Jednočásticové excitace v supravodičích a ve fermionových supratekutinách

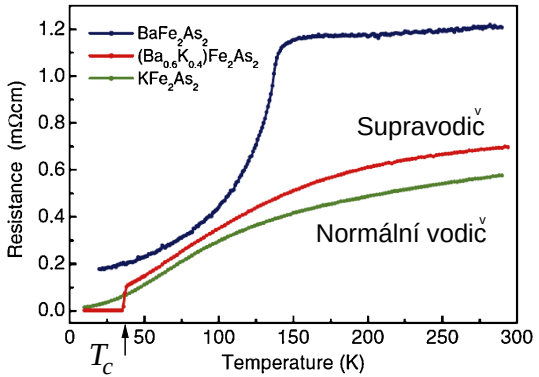
Dominik Munzar

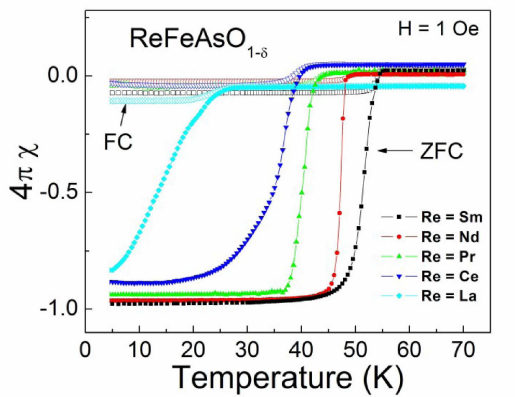
Brno, 2. 11. 2011

Osnova

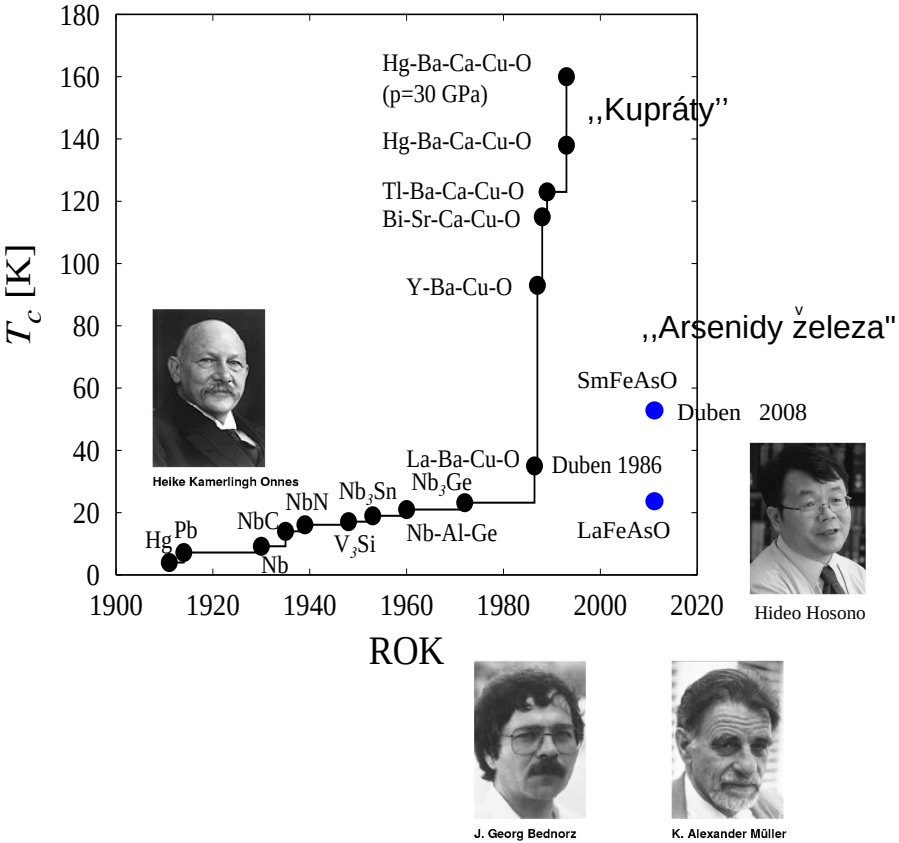
1. Základní pojmy
2. Shrnutí teorie BCS
   - Cooperův problém
   - Schriefferův ansatz
   - Přechod BEC $\longrightarrow$ BCS ve fermionových plynech
   - Jednočásticové excitace (Bogoljubovovy excitace)
3. Projevy Bogoljubovových excitací ve fotoemisních spektrech
4. Závěrečné poznámky

Definice supravodiče a kritická teplota





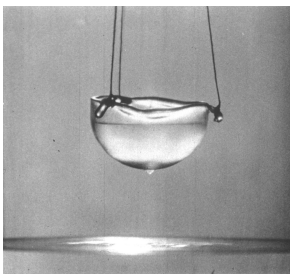
Rotter et al., PRL, 2008.
Ren et al., Europhys. Lett., 2008.



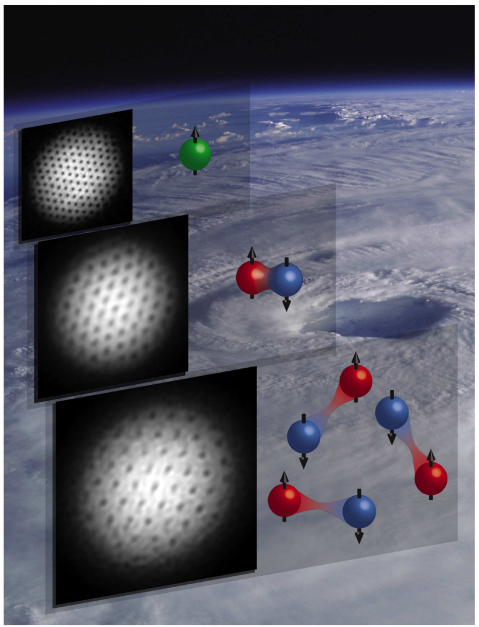
- Supravodivost=supratekutost nabitých částic.

K příčinám supratekutosti

- Landau: supratekutost způsobena vlastnostmi disperzní relace kolektivních módů (zejména linearita $E(k)$ pro malé hodnoty k, totéž zařídí en. mezera).
- London: supratekutost způsobena přítomností kondenzátu.
- Bogoljubov: z přítomnosti kondenzátu vyplývá linearita $E(k)$.



Spontánní vytékání st. helia z nádoby



Z www str. Ketterleho skupiny na MIT

The Nobel Prize in Physics 1972

"for their jointly developed theory of superconductivity, usually called the BCS-theory"

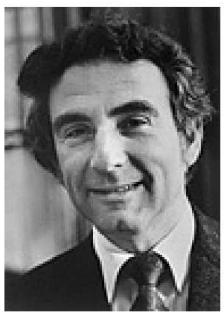
John Bardeen

1/3 of the prize

USA

University of Illinois
Urbana, IL, USA

b. 1908
d. 1991



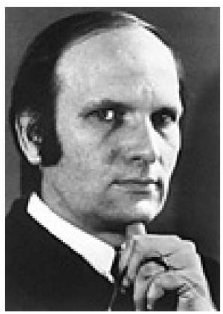
Leon Neil Cooper

1/3 of the prize

USA

Brown University
Providence, RI, USA

b. 1930



John Robert Schrieffer

1/3 of the prize

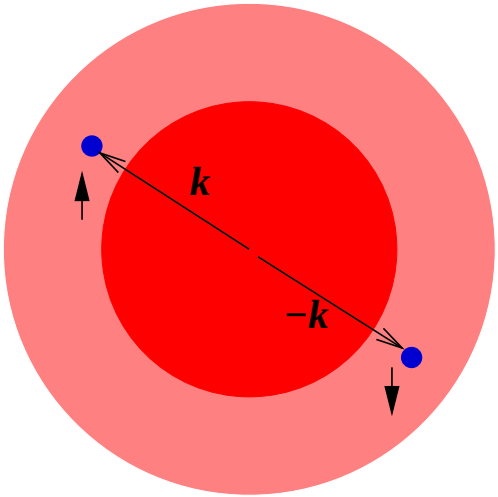
USA

University of Pennsylvania
Philadelphia, PA, USA

b. 1931

- Bardeen: přitažlivá interakce mezi elektrony vyvolaná elektron-fononovou interakcí.
- Cooper: libovolně slabá přitažlivá interakce vede ke vzniku párů elektronů (Cooperovy páry).
- Schrieffer: matematický popis kondenzátu párů (Schriefferova funkce).

Cooperův problém



- Elektrony interagují s potenciální energií $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$.
- Řešení hledáme ve tvaru

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \phi(\mathbf{r}_T)\psi(\mathbf{r})\chi(\sigma_1, \sigma_2)\,,$$

$$\phi(\mathbf{r}_T) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\,,\ \chi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_\uparrow(\sigma_1)\chi_\downarrow(\sigma_2) - \chi_\downarrow(\sigma_1)\chi_\uparrow(\sigma_2)\right]\,.$$

- Vlnovou funkci ψ lze psát ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k},|\mathbf{k}|>k_F} g_\mathbf{k} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\,.$$

- Po dosazení do Schrödingerovy rovnice dostaneme (energie páru E vztažená k $2E_F$)

$$2\epsilon_\mathbf{k} g_\mathbf{k} + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} = (E + 2E_F) g_\mathbf{k}\,,\ \epsilon_\mathbf{k} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{\Omega}\int V(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \mathrm{d}\mathbf{r}\,.$$

- Rovnici lze řešit analyticky pro

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -\frac{U}{\Omega} w_\mathbf{k} w_{\mathbf{k}'}\,,\ w_\mathbf{k} = 1 \text{ pro } 0 < \epsilon_\mathbf{k} - E_F < \hbar\omega_D\,,\ w_\mathbf{k} = 0 \text{ pro } \epsilon_\mathbf{k} - E_F > \hbar\omega_D\,.$$

Cooperův problém - pokračování

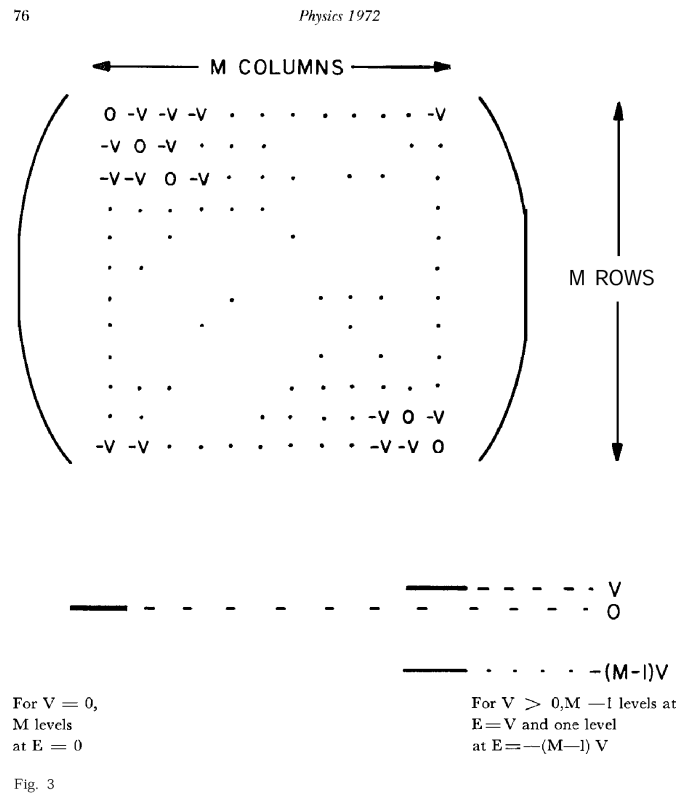


Fig. 3

Příklad matice vystupující ve Schr. r. pro funkci $g_{\mathbf{k}}$

- Výsledky: $g_{\mathbf{k}} = \frac{C}{E+2E_F-2\epsilon_{\mathbf{k}}}$ pro $\epsilon_{\mathbf{k}} - E_F < \hbar\omega_D$ (oblast IS), $= 0$ jinak, povolené hodnoty energie řešením rovnice

$$1 = -\frac{U}{\Omega}\sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{IS}} \frac{1}{E + 2E_F - 2\epsilon_{\mathbf{k}}}\,.$$

- Vždy existuje jedno řešení o záporné energii E. Za předpokladu, že $E_F >> \hbar\omega_D$, pro ně dostaneme

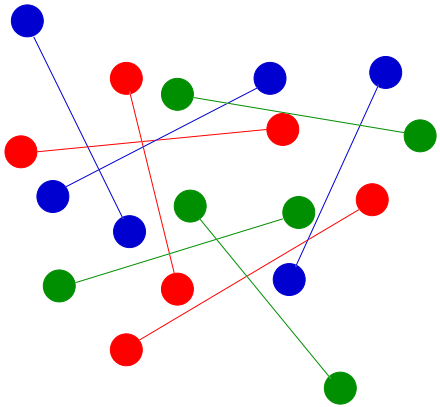
$$\frac{2}{|U|D(E_F)} = \ln\left(\frac{E-2\hbar\omega_D}{E}\right)\,.$$

Za předpokladu, že $|U|D(E_F) << 1$, dále dostaneme

$$E = -2\hbar\omega_D \mathrm{e}^{-\frac{2}{|U|D(E_F)}}\,.$$

- Rozměry páru. Odmocnina ze střední hodnoty kvadrátu vzdálenosti je rovna $\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{\hbar v_F}{E}$.

Schriefferův ansatz



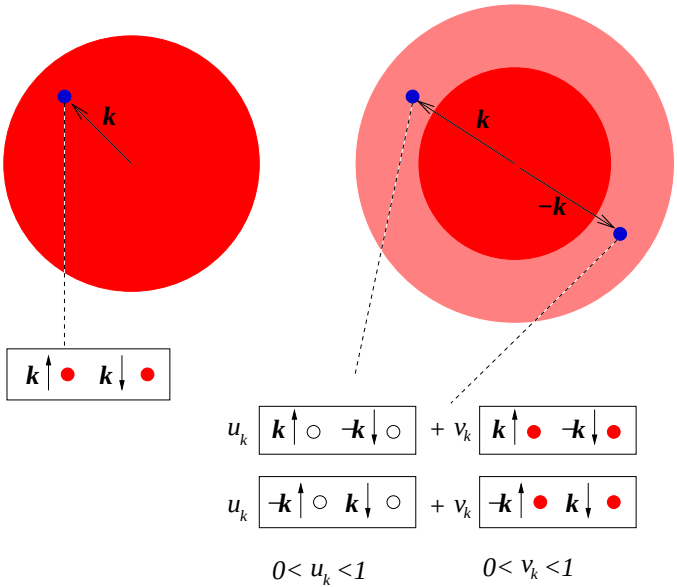


Schéma souboru párů, obsazená Fermiho koule pro neint. fermiony, Schriefferův stav

- V souřadnicové reprezentaci

$$\Psi_N = A\left\{\psi(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\uparrow(1)\downarrow(2)\psi(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_4)\uparrow(3)\downarrow(4)\ldots\psi(\mathbf{r}_{N-1}-\mathbf{r}_N)\uparrow(N-1)\downarrow(N)\right\}.$$

- Schriefferův stavový vektor v reprezentaci obsazovacích čísel:

$$\Pi_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}+v_{\mathbf{k}}c^{+}_{\mathbf{k}\uparrow}c^{+}_{-\mathbf{k}\downarrow})|\text{vakuum}\rangle\,,\ u^2_{\mathbf{k}}+v^2_{\mathbf{k}}=1, P_N|\Psi_S\rangle\sim|\Psi_N\rangle\,.$$

Schriefferův ansatz - pokračování

- Způsob určení hodnot parametrů u_k a v_k. Hledáme, pro které hodnoty nastane minimum výrazu $\langle \Psi_S | H_{\mathrm{red}} - \mu N | \Psi_S \rangle$, kde

$$H_{\mathrm{red}} = \sum_{\mathbf{k}s} \epsilon_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c^+_{\mathbf{k}\uparrow} c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}$$

  je tzv. redukovaný hamiltonián, ponechány pouze členy ,,prohazující'' páry.

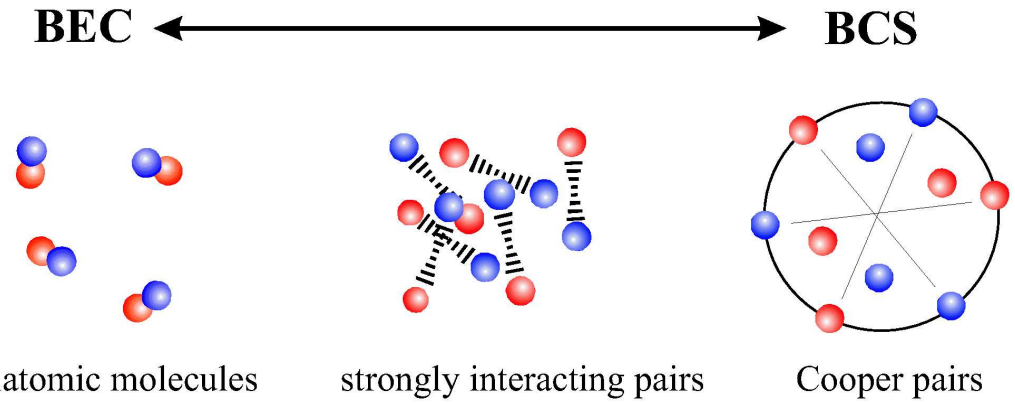
- Výsledné vzorce:

$$u^2_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right),\ v^2_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right),\ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}},$$

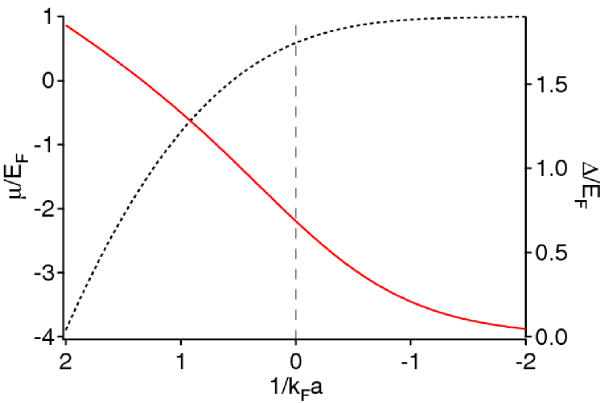
  kde $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2_{\mathbf{k}}}$ a $\Delta_{\mathbf{k}}$, tzv. supravodivá mezera, je řešením rovnice

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}}.$$

Přechod BEC-BCS



Cindy Regal, Ph.D thesis



Ketterle a Zwierlein, arXiv:0801.2500v1

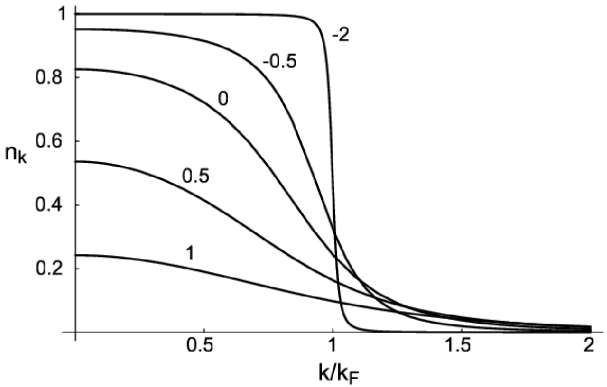
- Zde k_F je poloměr Fermiho koule, a veličina o rozměru délky charakterizující sílu interakce.

$$a = \frac{\pi}{2}\frac{R}{1 + (2\pi^2 R/v_0)},$$

kde v_0 je $mV_0/(4\pi\hbar^2)$, V_0 je Fourierova komponenta potenciální energie mezifermionové interakce, $V_0 < 0$, $\hbar/R$ je ,,cut-off" pro vlnový vektor.

- $1/k_F a < 0$ slabá interakce ... velké páry, BCS. $1/k_F a > 0$ silná interakce ... malé páry, BEC.

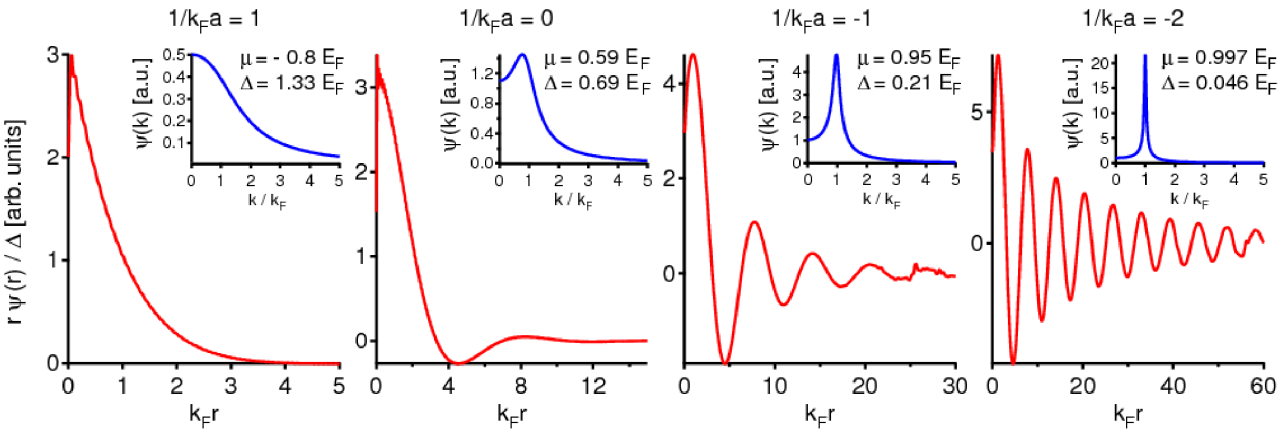
Přechod BEC-BCS - pokračování



Nalevo: obsazení jednofermionových hladin v závislosti na $1/(k_F a)$.

Dole:vlnová funkce páru v závislosti na $1/(k_F a)$.

Ketterle a Zwierlein. arXiv:0801.2500v1



Ketterle a Zwierlein, arXiv:0801.2500v1

Jednočásticové excitace

- Cíl: hamiltonián

$$H'_{\rm red} = H - \mu N = \sum_{\mathbf{k}s} \xi_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c^+_{\mathbf{k}\uparrow} c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} = \sum_{\mathbf{k}s} \xi_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b^+_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}'} \,,$$

  kde $b^+_{\mathbf{k}} = c^+_{\mathbf{k}\uparrow} c^+_{-\mathbf{k}\downarrow}$, $b_{\mathbf{k}} = c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}$ a $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, převést do tvaru odpovídajícího systému neinteragujících fermionů.

- Přiblížení středního pole. Ve stavu $|\Psi_S\rangle$ mají operátory $b^+_{\mathbf{k}}$ a $b_{\mathbf{k}}$ nenulovou střední hodnotu:

$$\langle \Psi_S | b^+_{\mathbf{k}} | \Psi_S \rangle = \langle \Psi_S | b_{\mathbf{k}} | \Psi_S \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = q_{\mathbf{k}} \,.$$

  Lze předpokládát, že pro nízkoexcitované stavy se tyto operátory příliš od svých středních hodnot neliší. Tj., lze psát

$$b^+_{\mathbf{k}} = q_{\mathbf{k}} + \delta b^+_{\mathbf{k}} \,, b_{\mathbf{k}} = q_{\mathbf{k}} + \delta b_{\mathbf{k}}$$

  a předpokládat, že fluktuace δ jsou malé. Po zanedbání členů druhého řádu v δ $H'_{\rm red} \to H_{MF}$, kde

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k},s} \xi_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k},s} c_{\mathbf{k},s} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}\uparrow} c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} q_{\mathbf{k}} \,,$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} \tilde{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} q_{\mathbf{k}'} \,.$$

Jednočásticové excitace - pokračování

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k},s} \xi_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k},s} c_{\mathbf{k},s} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}\uparrow} c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} q_{\mathbf{k}} \,.$$

- Bogoljubovova transformace.

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c^+_{\mathbf{k}\uparrow}, c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} \rightarrow \gamma_{0\mathbf{k}}, \gamma_{1\mathbf{k}}, \gamma^+_{0\mathbf{k}}, \gamma^+_{1\mathbf{k}} \,,$$

$$\gamma_{0\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} \,,\; \gamma^+_{1\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} \,.$$

Při vhodné volbě parametrů, $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$,

$$u^2_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \,,\; v^2_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \,, E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2_{\mathbf{k}}}$$

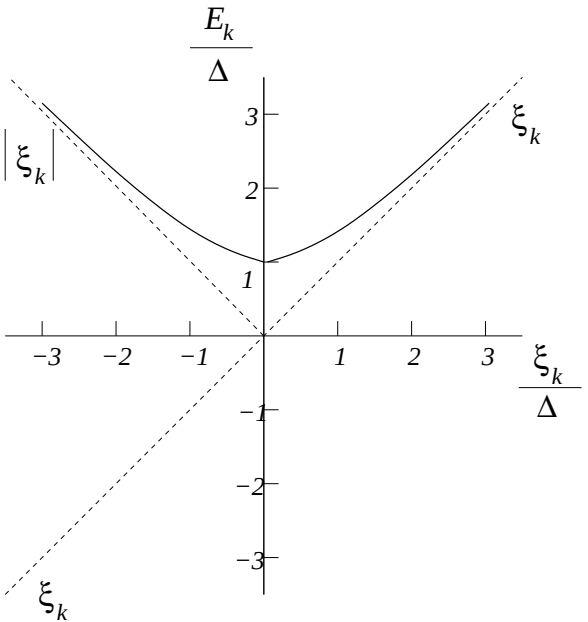
přejde H_{MF} do tvaru

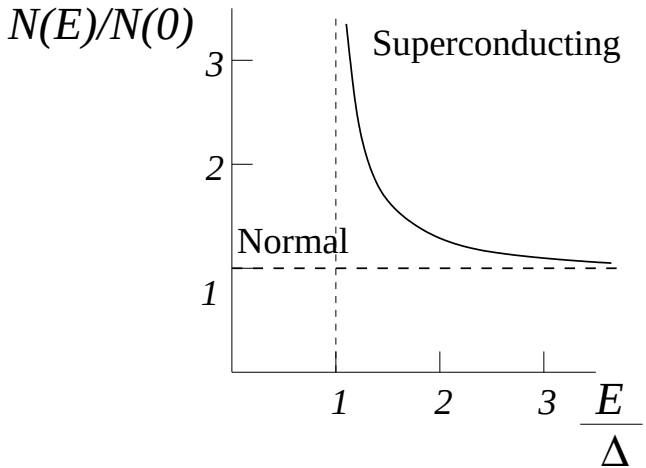
$$H_M = \text{konst.} + \sum_k E_k [\gamma^+_{0k}\gamma_{0k} + \gamma^+_{1k}\gamma_{1k}] \,,$$

tj. hamiltonián souboru nezávislých fermionů, tzv. Bogoljubovových excitací s disperzní relací $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2_{\mathbf{k}}}$. Podmínka selfkonsistence:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} [1 - 2 f_{FD}(E_{\mathbf{k}'})] \,.$$

Dispersní relace a hustota stavů pro Bogoljubovovy excitace



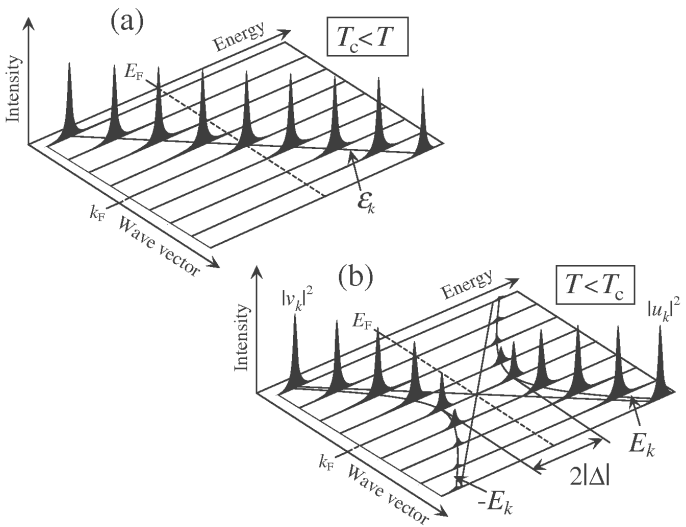


- V normálním stavu je hustota stavů $N(E)$ v okolí Fermiho energie slabě závislá na energii, $N(E) \approx N(0)$.
- V supravodivém stavu je $N = 0$ pro energie menší než Δ. Vzorec pro $N_\mathrm{s}(E)$ lze odvodit takto. Z vzájemně jednoznačné korespondence mezi excitovanými stavy normálního kovu a exc. stavy supravodiče vyplývá

$$N_s(E)\mathrm{d}E = N_\mathrm{n}(\xi)\mathrm{d}\xi\,,\ \frac{N_\mathrm{sc}(E)}{N_\mathrm{n}(\xi)} = \frac{N_\mathrm{sc}(E)}{N_\mathrm{n}(0)} = \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}E} = \frac{\mathrm{d}\sqrt{E^2-\xi^2}}{\mathrm{d}E} = \frac{E}{\sqrt{E^2-\Delta^2}}\,.$$

Projevy Bogoljubovových excitací ve fotoemisních spektrech

- Spektrální funkce $A(\mathbf{k}, E)$. Zhruba: hustota stavů pro dané $\mathbf{k}$. Přesněji: $A(\mathbf{k}, E) = A_+(\mathbf{k}, E) + A_-(\mathbf{k}, -E)$, kde A_+ je energiové spektrum stavu systému s elektronem přidaným do stavu s vlnovým vektorem $\mathbf{k}$, energie vztaženy k $E_0 + \mu$;
  podobně A_- je energiové spektrum stavu systému s elektronem ubraným ze stavu s vlnovým vektorem $\mathbf{k}$, energie vztaženy k $E_0 - \mu$.
- Spektrální hustota. Zhruba: hustota stavů. Přesněji: $A(E) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, E)$.
- Vztah mezi spektrální funkcí a spektrální hustotou $I(\mathbf{k}, E)$ fotoelektronů o daném $\mathbf{k}$: $I(\mathbf{k}, E') \sim A(\mathbf{k}, E = h\nu - E' - W) f_{FD}(E)$.



Matsui et al., PRL 2003.

Fotoemisní spektra pro supravodič Bi2223

VOLUME 90, NUMBER 21 PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 30 MAY 2003

BCS-Like Bogoliubov Quasiparticles in High-T_c Superconductors Observed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy

H. Matsui,[1] T. Sato,[1] T. Takahashi,[1] S.-C. Wang,[2] H.-B. Yang,[2] H. Ding,[2] T. Fujii,[3,*] T. Watanabe,[4,†] and A. Matsuda[4]

[1]*Department of Physics, Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan*

[2]*Department of Physics, Boston College, Chestnut Hill, Massachusetts 02467, USA*

[3]*Department of Applied Physics, Faculty of Science, Science University of Tokyo, Tokyo 162-8601, Japan*

[4]*NTT Basic Research Laboratories, Atsugi 243-0198, Japan*

(Received 6 August 2002; published 29 May 2003)

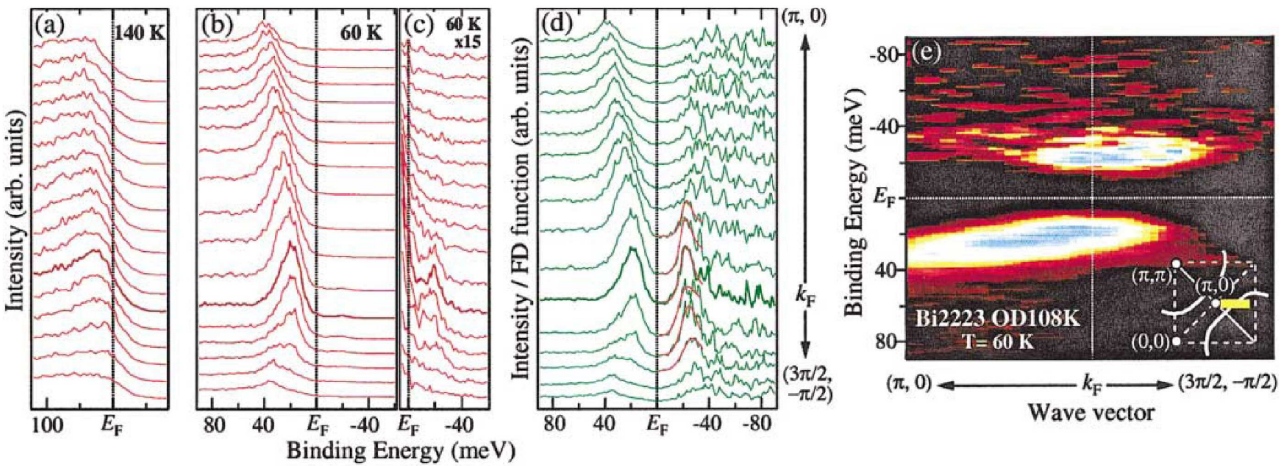
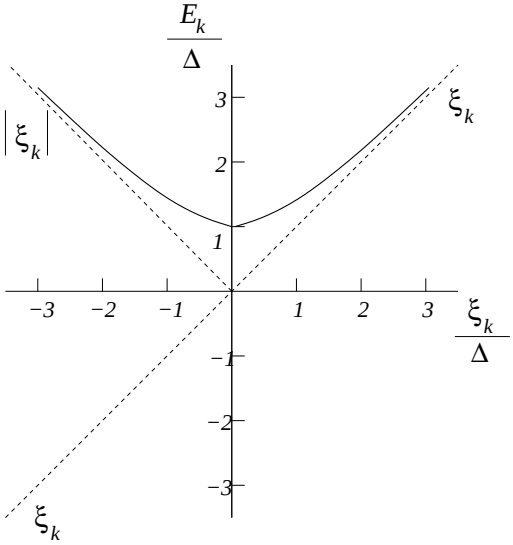
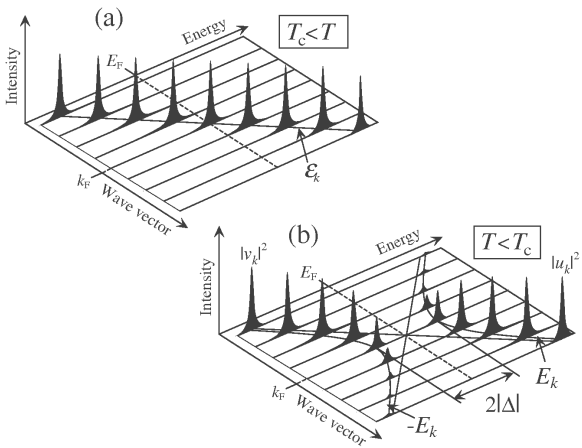
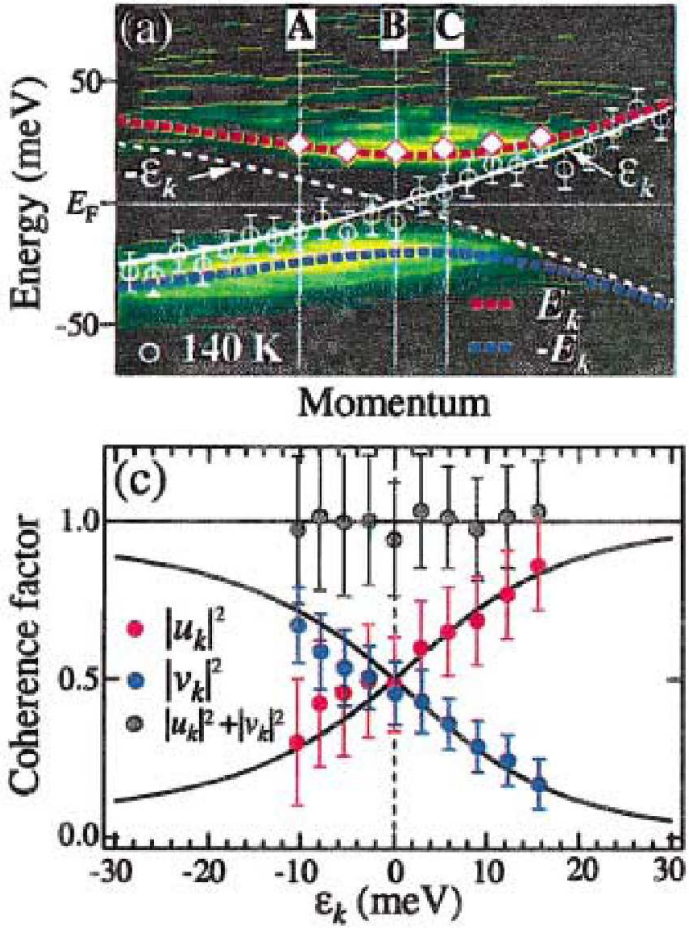


FIG. 2 (color). (a) ARPES spectra of Bi2223 in the normal state (140 K) measured along a yellow line in the Brillouin zone shown in the inset in (e). Spectrum at k_F is indicated by a dark red line. (b) ARPES spectra taken under the same condition as in (a) but at the superconducting state (60 K). (c) Same as (b) in an expanded intensity scale above E_F. (d) ARPES spectra in (b) divided by the FD function at 60 K convoluted with a Gaussian reflecting the instrumental resolution. Spectrum at k_F is indicated by a dark green line. Red lines are fitting curves for unoccupied states using a Lorentzian with energy-dependent broadening factor. Fittings are restricted to the spectra of which peak positions are located within $5k_BT$ from E_F. (e) Intensity plot of normalized ARPES spectra in (d) as a function of binding energy and wave vector. Momentum region is the same in (a)–(d).





Matsui et al., PRL 2003.



Matsui et al., PRL 2003.

Fotoemisní spektra pro systém fermionových atomů (^{40}K)

measured kinetic energy, $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$. Here $\hbar = h/2\pi$, where h is Planck's constant, and m is the particle mass. By conservation of energy, we can determine the energy of the original single-particle state, E_S, using

$$E_S = \varepsilon_k + \varphi - h\nu \quad (1)$$

Here $h\nu$ is the photon energy, φ is the work function of the surface and $E_F - E_S$ is often referred to as the binding energy[8] (E_F is the Fermi energy).

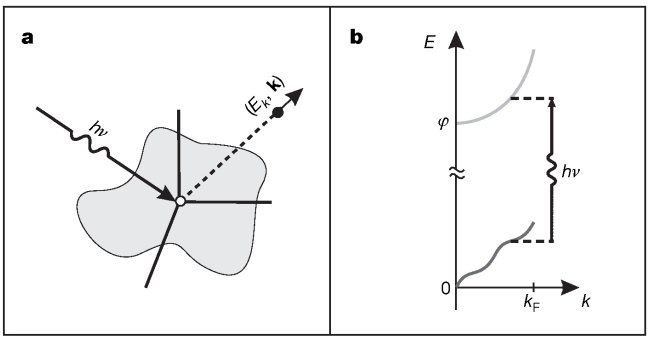


Figure 1 | Photoemission spectroscopy for ultracold atom gases. **a**, In electron photoemission spectroscopy, the energy of electrons emitted from solids, liquids or gases is measured using the photoelectric effect. Using energy conservation, the original energy of the electrons in the substance can be determined. Similarly, in photoemission spectroscopy for atoms, a radio-frequency photon with energy $h\nu$ transfers atoms into a weakly interacting spin state. **b**, The radio-frequency photon drives a vertical transition where the momentum $\hbar k$ is essentially unchanged. By measuring the energy and momentum of the outcoupled atoms (upper curve) we can determine the quasi-particle excitations and their dispersion relation (lower curve). Here φ is the Zeeman energy difference between the two different spin states of the atom.

J. T. Stewart, J. P. Gaebler, D. S. Jin, Nature **454**, 744 (2008).

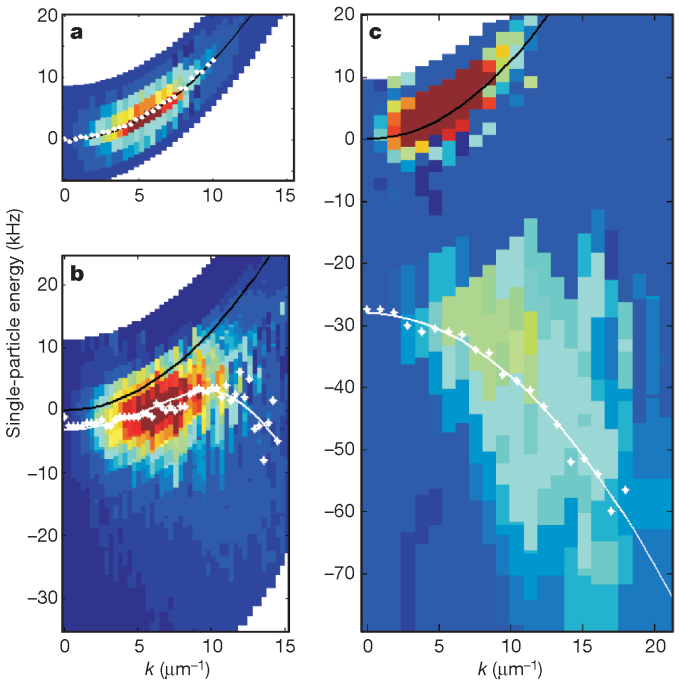
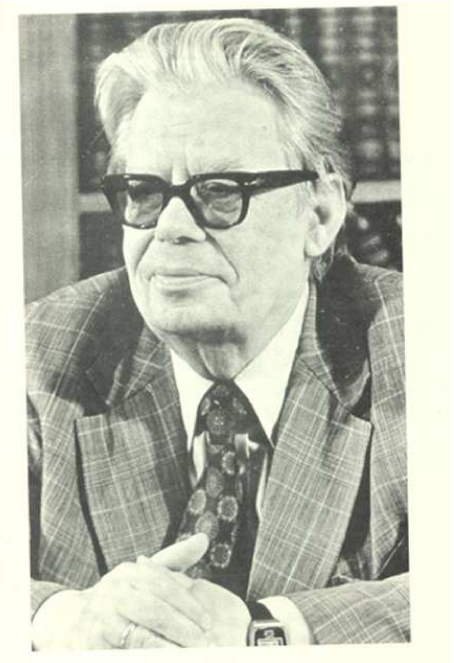


Figure 3 | Single-particle excitation spectra obtained using photoemission spectroscopy of ultracold atoms. Plotted are intensity maps (independently scaled for each plot) of the number of atoms outcoupled to a weakly interacting spin state as a function of the single-particle energy E_S (expressed as frequency) and wavenumber k. Black lines show the expected dispersion curves for an ideal Fermi gas. White symbols mark the centre of each fixed-k energy distribution curve. **a**, Data for a very weakly interacting Fermi gas. The Fermi wavevector k_F^0 is $8.6 \pm 0.3\ \mu m^{-1}$. **b**, Data for a strongly interacting Fermi gas where $1/k_F^0 a = 0$ and $T \approx T_c$. The white line is a fit of the centres to a BCS-like dispersion. **c**, Data for a gas on the BEC side of the resonance where $1/k_F^0 a \approx 1$ and the measured two-body binding energy is $h \times (25 \pm 2\ \text{kHz})$. We attribute the upper feature to unpaired atoms and the lower feature to molecules. The white line is a fit to the centres using a quadratic dispersion.

Závěrečné poznámky

- Připomenuty základy teorie BCS.
- Přechod BEC (kondenzát molekul) $\longrightarrow$ BCS.
- Energiová mezera a Bogoljubovovy excitace pozorovány ve fotoemisních spektrech kuprátových supravodičů (energie fotonů v eV, charakteristické energie v meV) i ve spektrech systémů se supratekutými fermionovými kondenzáty (energie fotonů a charakteristické energie v řádu 10 kHz).
- Příští týden kurz Vladimira Krasnova „Tunneling experiments on superconductors".



N. N. Bogoljubov