2. Übung

Theoretische Physik (NT)
Universität des Saarlandes
Prof. Dr. Heiko Rieger

Bitte werfen Sie Ihre Lösung bis zum 03.05.2017 um 12 Uhr in das Postfach von Prof. Dr. Heiko Rieger im Erdgeschoss von Gebäude E2 6 ein. Die Abgabe sollte in Zweiergruppen erfolgen.

1. [*5 Punkte*] **Feldgleichung**

Beweisen Sie die folgende Identität:

$$\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x},t)+\int d^3x'\psi^\dagger(\mathbf{x}',t)V(\mathbf{x}',\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}',t)\psi(\mathbf{x},t)$$

Gehen Sie dazu von der Heisenberg-Bewegungsgleichung $\imath\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t)=-\left[\hat{H},\psi(\mathbf{x},t)\right]$ aus.

2. [*4 Punkte*] **Zweite Quantisierung eines Hamilton-Operators mit Yukawa-Wechselwirkung**

Wir betrachten N identische quantenmechanische Teilchen, die über ein Yukawa-Potential miteinander wechselwirken, also durch folgenden Hamiltonian beschrieben werden:

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{p}_i^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{c\,\mathrm{e}^{-\lambda|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}$$

mit $c<0$ und der sogenannten Abschirmlänge $\lambda>0$. Zeigen Sie, dass der Hamiltonian sich mit Erzeugern und Vernichtern von ebenen Wellen (für Bosonen und für Fermionen) im Kontinuumslimes schreiben lässt als:

$$\hat{H}=C_1\int d^3k\,\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}+C_2\iiint d^3k\,d^3p\,d^3q\;\frac{1}{q^2+\lambda^2}\;\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$$

3. [*5 Punkte*] **Teilchenzahloperator**

Zeigen Sie, dass für Bosonen und Fermionen der Teilchenzahloperator $\hat{N}=\sum_i\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i$ mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H}=\sum_{ij}\hat{a}_i^\dagger\left\langle i\right|\hat{T}\left|j\right\rangle\hat{a}_j+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j^\dagger\left\langle ij\right|\hat{V}\left|kl\right\rangle\hat{a}_l\hat{a}_k$$

vertauscht.

4. [*10 Punkte*] **Hubbard-Modell**

Betrachten Sie Elektronen auf einem Gitter, wobei die am Gitterplatz $\mathbf{R}_i$ lokalisierte 1-Teilchen-Wellenfunktion durch $\varphi_{i\sigma}(\mathbf{x})=\chi_\sigma\varphi_i(\mathbf{x})$ mit $\varphi_i(\mathbf{x})=\phi(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i)$ gegeben ist. Ein Hamiltonoperator, $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$, bestehend aus einem spin-unabhängigen 1-Teilchen-Operator $\hat{T}=\sum_{\alpha=1}^{N}\hat{t}_\alpha$ und 2-Teilchen-Operator $\hat{V}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\hat{V}^{(2)}(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{x}_\beta)$ lässt sich in der Basis $\{\varphi_{i\sigma}\}$ darstellen durch

$$\hat{H}=\sum_{i,j}\sum_{\sigma}t_{ij}\hat{a}^\dagger_{i\sigma}\hat{a}_{j\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}\sum_{\sigma,\sigma'}V_{ijkl}\hat{a}^\dagger_{i\sigma}\hat{a}^\dagger_{j\sigma'}\hat{a}_{l\sigma'}\hat{a}_{k\sigma}\ ,$$

wobei die Matrixelemente durch $t_{ij}=\left\langle i\right|\hat{t}\left|j\right\rangle$ und $V_{ijkl}=\left\langle ij\right|\hat{V}^{(2)}\left|kl\right\rangle$ bestimmt sind. Nimmt man an, dass die Überlappung der Wellenfunktionen $\varphi_i(\mathbf{x})$ an verschiedenen Gitterplätzen nur sehr klein ist, so lassen sich die folgenden Näherungen durchführen:

$$t_{ij}=\begin{cases}\omega & \text{für } i=j,\\ t & \text{für } i \text{ und } j \text{ nächste Nachbarplätze,}\\ 0 & \text{sonst}\end{cases}$$

$V_{ijkl}=V_{ij}\delta_{il}\delta_{jk}$ mit $V_{ij}=\int d^3x\int d^3y\,|\varphi_i(\mathbf{x})|^2\hat{V}^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{y})|\varphi_j(\mathbf{y})|^2$.

$\boxed{6}$ (a) Bestimmen Sie die Matrixelemente V_{ij} für eine Kontaktwechselwirkung

$$\hat{V}=\frac{\lambda}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\delta(\mathbf{x}_\alpha-\mathbf{x}_\beta)$$

zwischen den Elektronen für die folgenden Fälle:

Benjamin Bogner, E2 6, Zi.4.27 — bbogner@lusi.uni-sb.de
Anne Hafner, E2 6, Zi.4.23 — anne.hafner@lusi.uni-sb.de

i. „on-site" Wechselwirkung $i = j$

ii. nächste-Nachbar-Wechselwirkung (i und j benachbarte Gitterpunkte)

Nehmen Sie dazu an, dass ein quadratisches Gitter mit Gitterkonstante a vorliegt und die Wellenfunktion durch Gauß-Funktionen gegeben sind:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Delta^{3/2}\pi^{3/4}} \exp\left(-\mathbf{x}^2/2\Delta^2\right)$$

$\boxed{4}$ (b) Im Limes $\Delta \ll a$ ist die on-site Wechselwirkung $U = V_{ij}$ der dominante Beitrag. Bestimmen Sie in diesem Grenzfall die Form des Hamilton-Operators in zweiter Quantisierung. Das so erhaltene Modell heißt Hubbard-Modell.

5. [*6 Punkte*] **Paarverteilungsfunktion**

Wegen des Pauli-Prinzips sind auch nicht wechselwirkende Fermionen mit demselben Spin untereinander korreliert. Ein Maß für die Korrelation ist die Paarverteilungsfunktion $g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ mit:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \sum_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'} \mathrm{e}^{-\imath(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r} - \imath(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')\cdot\boldsymbol{r}'} \langle\phi_0|\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{q}\sigma'}\hat{a}_{\boldsymbol{q}'\sigma'}\hat{a}_{\boldsymbol{k}'\sigma}|\phi_0\rangle.$$

Zeigen Sie die folgenden Relationen:

$\boxed{2}$ (a) $g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = 1$ für $\sigma \neq \sigma'$.

$\boxed{4}$ (b) $\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \left(\frac{n}{2}\right)^2 - \left(G_\sigma(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\right)^2$ für $\sigma = \sigma'$.

6. [*10 Punkte*] **Strukturfunktion für wechselwirkungsfreie Fermionen**

$\boxed{4}$ (a) Berechnen Sie die statische Strukturfunktion für wechselwirkungsfreie Fermionen

$$S^0(\boldsymbol{q}) \equiv \frac{1}{N}\langle\phi_0|\hat{n}_{\boldsymbol{q}}\hat{n}_{-\boldsymbol{q}}|\phi_0\rangle,$$

wobei $\hat{n}_{\boldsymbol{q}} = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\,\sigma}\hat{a}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\,\sigma}$ der Teilchendichteoperator in der Impulsdarstellung und $|\phi_0\rangle$ der Grundzustand ist. Führen Sie den Kontinuumslimes $\sum_{\boldsymbol{k},\sigma} = 2V \int d^3k/(2\pi)^3$ durch und berechnen Sie $S^0(\boldsymbol{q})$ explizit. *Anleitung:* Betrachten Sie die Fälle $\boldsymbol{q} = 0$ und $\boldsymbol{q} \neq 0$ getrennt.

$\boxed{3}$ (b) Zeigen Sie, dass für wechselwirkungsfreie Fermionen

$$\begin{aligned} S^0(\boldsymbol{q},\omega) &\equiv \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \mathrm{e}^{\imath\omega t}\langle\phi_0|\hat{n}_{\boldsymbol{q}}(t)\hat{n}_{-\boldsymbol{q}}(0)|\phi_0\rangle \\ &= \frac{\hbar V}{2\pi^2 N}\int d^3k\,\Theta(k_\mathrm{F} - k)\,\Theta(|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}| - k_\mathrm{F})\,\delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + 2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q})\right) \end{aligned}$$

ist.

$\boxed{3}$ (c) Weisen Sie ferner die Beziehung

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}S^0(\boldsymbol{q},\omega) = \begin{cases} N & \text{für } \boldsymbol{q} = 0, \\ 1 - \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\hat{n}_{\boldsymbol{k}\,\sigma}\hat{n}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\,\sigma} & \text{für } \boldsymbol{q} \neq 0 \end{cases}$$

nach, wobei $\hat{n}_{\boldsymbol{k}\,\sigma} = \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\,\sigma}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\,\sigma}$ ist.

Benjamin Bogner, E2 6, Zi.4.27 — bbogner@lusi.uni-sb.de

Anne Hafner, E2 6, Zi.4.23 — anne.hafner@lusi.uni-sb.de