Bitte werfen Sie Ihre Lösung bis zum 10.05.2017 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. [*8 Punkte*] **Bogoliubov-Transformationen**

In der Vorlesung wurde für ein System von schwach wechselwirkenden Bosonen die Bogoliubov-Näherung besprochen, im Rahmen derer das System durch den Hamiltonian $\hat{H} \approx \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \frac{k^2}{2m} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{N^2}{2V} V_0 + \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{N}{2V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \left(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} \right)$ beschrieben wird. Dieser Hamiltonian wird durch die Bogoliubov-Transformation diagonalisiert, die lautet:

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}^\dagger_{-\mathbf{k}} \quad ; \quad \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \text{ mit } u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}} = 1 \ .$$

$\boxed{2}$ (a) Verifizieren Sie, dass $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ und $\hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}}$ wieder Bose-Operatoren sind, indem Sie $[\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}] = [\hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}'}] = 0$ und $[\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}'}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ zeigen.

$\boxed{2}$ (b) Beweisen Sie, dass die folgenden Umkehrtransformationen gelten:

$$\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}} \ ; \ \hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} \ .$$

$\boxed{2}$ (c) Zeigen Sie, dass sich der angegebene Hamiltonoperator für den Fall tiefer Temperaturen, wenn es zur Bose-Einstein-Kondensation kommt, in Bogoliubov-Näherung wie folgt darstellen lässt:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \frac{1}{2V} N^2 V_0 + \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \left(\frac{k^2}{2m} + \frac{N}{V} V_{\mathbf{k}} \right) \left[u^2_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}^\dagger_{-\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \right) \right] \\ + \frac{N}{2V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} \left[(u^2_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}}) \left(\hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}^\dagger_{-\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} \right) + 2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}^\dagger_{\mathbf{k}} \right) \right] \ . \end{aligned}$$

$\boxed{2}$ (d) Verifizieren Sie für ein Kontakt-Potential $V(\mathbf{r}) = \xi \delta(\mathbf{r})$ die in der Vorlesung angegeben Dichte $n' = N'/V = \frac{m^{3/2}}{3\pi^2} (\xi n)^{3/2}$ der Teilchen außerhalb des Kondensats.

2. [*8 Punkte*] **Teilchen im periodischen Potential**

Betrachten Sie ein Kristallgitter, welches aus räumlich streng periodisch angeordneten und als ruhend angesehenen Atomen aufgebaut ist. Ein einzelnes Elektron bewegt sich folglich in einem elektrischen Feld $V(\mathbf{x})$, das von den Atomkernen erzeugt wird. Aufgrund der periodischen Gestalt des Gitters gilt $V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + \mathbf{R})$ mit $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$, wobei die $\mathbf{a}_i$ die Gittervektoren darstellen und die n_i ganze Zahlen sind. Dieses Problem wird beschrieben durch die Schrödingergleichung

$$\hat{H} \varphi(\mathbf{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \varphi(\mathbf{x}) = E \varphi(\mathbf{x}) \quad .$$

Wir definieren den Translationsoperator $\hat{T}_{\mathbf{l}}$, um die Periodizität von $V(\mathbf{x})$ im Folgenden einfacher ausnutzen zu können. Angewendet auf eine beliebige Funktion $F(\mathbf{x})$ gilt $\hat{T}_{\mathbf{l}} F(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x} + \mathbf{l})$.

$\boxed{2}$ (a) Zeigen Sie, dass $\hat{H}$ und $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ kommutieren.

$\boxed{2}$ (b) Eigenfunktionen $\varphi(\mathbf{x})$ von $\hat{H}$ sind somit auch Eigenfunktionen von $\hat{T}_{\mathbf{R}}$:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} \varphi(\mathbf{x}) = c(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{x}) \quad .$$

Zeigen Sie, dass die Eigenwerte multiplikativ sind: $c(\mathbf{R}_1) c(\mathbf{R}_2) = c(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)$.

$\boxed{4}$ (c) Diese Eigenschaft können wir über einen Exponentialansatz beschreiben, sodass für die Gittervektoren $\mathbf{a}_i$ gilt

$$c(\mathbf{a}_i) = \exp(2\pi \imath x_i)$$

mit $x_i \in \mathbb{C}$. Geben Sie $c(\mathbf{R})$ für einen beliebigen Punkt $\mathbf{R}$ an. Folgern Sie, warum für $\mathbf{R}$ und einen beliebigen reziproken Gittervektor $\mathbf{k}$ die Aussage des Bloch-Theorems erfüllt ist:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} \varphi(\mathbf{x}) = \exp(\imath \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \varphi(\mathbf{x}) \quad .$$

Das Bloch-Theorem sagt also aus, dass die Lösung einer Schrödingergleichung mit periodischem Potential als $\varphi(\mathbf{x}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{\imath \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ geschrieben werden kann, wobei $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{R})$.

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

3. [*14 Punkte*] **Kronig-Penney-Modell**
Betrachten Sie das eindimensionale periodische Potential

$$V(x) = -v_0 \sum_n \delta(x - na)$$

mit $v_0 > 0$, also attraktive Delta-Peaks an den Gitterplätzen na.

3 (a) Lösen Sie die Schrödingergleichung für gebundene Zustände. Nutzen Sie dabei den Ansatz

$$\psi(x) = C_n e^{\kappa(x-na)} + D_n e^{-\kappa(x-na)}$$

für $na < x < (n+1)a$. Wie hängt κ mit den gesuchten Eigenenergien zusammen?

4 (b) Nutzen Sie das Bloch-Theorem, um einen Zusammenhang zwischen den Koeffizienten C_n, D_n und C_{n-1}, D_{n-1} zu erhalten und leiten Sie ein homogenes Gleichungssystem für C_{n-1} und D_{n-1} her. Wann hat dieses nicht-triviale Lösungen?

3 (c) Zeigen Sie, dass zwischen κ und k die Beziehung

$$\kappa \cosh(\kappa a) - \frac{mv_0}{\hbar^2} \sinh(\kappa a) = \kappa \cos(ka)$$

erfüllt sein muss, damit Eigenwerte existieren.

2 (d) Zeigen Sie, dass nicht für jede Energie eine Lösung existiert.

2 (e) Zeichnen Sie die Energie als Funktion des Impulses. Bestimmen Sie die Position der Lücken im Spektrum und schätzen Sie deren Breite ab.

4. [*10 Punkte*] **Hartree-Fock-Ansatz für Kristallelektronen**
Die Schrödingergleichung für Elektronen auf einem Kristallgitter lautet:

$$\left[\int d^3x\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_G(\mathbf{x})\right\} \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\int\int d^3x\, d^3x'\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}')\, \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \hat{\psi}(\mathbf{x}')\, \hat{\psi}(\mathbf{x})\right] |\Phi\rangle = E\,|\Phi\rangle \quad .$$

Die Feldoperatoren $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ und $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$ für die Elektronen werden nach Funktionen $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ entwickelt

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_k \hat{a}_k \varphi_k(\mathbf{x}) \quad , \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \varphi_k^*(\mathbf{x}) \quad ,$$

wobei die $\varphi_k(\mathbf{x})$ orthonormiert, aber nicht notwendigerweise Lösungen einer bestimmten Schrödingergleichung seien. Bei $V_G(\mathbf{x})$ handelt es sich um das gitterperiodische Potential aus Aufgabe 2. Die Bestimmung der $\varphi_k(\mathbf{x})$ erfolgt über das Hartree-Fock-Verfahren.

6 (a) Nutzen Sie die angegebene Entwicklung von $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ und $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$, um den Erwartungswert $\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle$ für die Energie des Systems zu berechnen, wobei der Zustand als $|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^N \hat{a}_{k_i}^\dagger |0\rangle$ angesetzt ist. Bestimmen Sie dazu zunächst die Erwartungswerte $\langle\Phi|\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l|\Phi\rangle$ und $\langle\Phi|\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \hat{a}_{m'}|\Phi\rangle$

4 (b) Die Einzelwellenfunktionen sollen nun derart bestimmt werden, dass der Erwartungswert der Energie extremal wird. Zur Berücksichtigung der Nebenbedingung der Orthonormiertheit der Wellenfunktionen werde der Lagrange-Parameter E eingeführt.
Führen Sie unter Beachtung der Nebenbedingung die Variationsableitung von $\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle$ nach $\varphi_k^*(\mathbf{x})$ aus, um folgende Schrödingergleichung zu erhalten:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_G(\mathbf{x}) + \tilde{V}(\mathbf{x})\right\} \varphi_k(\mathbf{x}) - \sum_{k'} A_{k',k}(\mathbf{x})\, \varphi_{k'}(\mathbf{x}) = E\varphi_k(\mathbf{x})$$

mit $\tilde{V}(\mathbf{x}) = \sum_{k'} \int d^3x'\, |\varphi_{k'}(\mathbf{x}')|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$ und $A_{k',k}(\mathbf{x}) = \int d^3x'\, \varphi_{k'}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \varphi_k(\mathbf{x}')$.
$\tilde{V}(\mathbf{x})$ beschreibt das elektrostatische Potential, das von den Ladungsverteilungen der Elektronen in den Zuständen k' herrührt. $A_{k',k}(\mathbf{x})$ ist die Coulombsche Austauschwechselwirkung.

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