Bitte werfen Sie Ihre Lösung bis zum 02.05.2017 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. [*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 $\sigma = \sigma'$.

2. [*15 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:

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

u_k und v_k sind dabei reelle, symmetrische Koeffizienten.

$\boxed{3}$ (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.

$\boxed{3}$ (b) Beweisen Sie, dass die folgenden Umkehrtransformationen gelten:

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

$\boxed{4}$ (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:

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

$\boxed{5}$ (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.
Hinweis: Zeigen Sie, dass

$$n' = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\frac{2\xi^2m^2n^2}{\mathbf{k}^2\left(\mathbf{k}^2 + 4\xi mn + (\mathbf{k}^2 + 2\xi mn)\sqrt{1 + \frac{4\xi mn}{\mathbf{k}^2}}\right)}$$

gilt. Sie dürfen für die Berechnung dieses Integrals z.B. Mathematica benutzen.

Thierry Fredrich, E2 6, Zi.4.27
thierry@lusi.uni-sb.de
Johannes Sicks, E2 6, Zi.4.24
johannes@lusi.uni-sb.de

3. [*7 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 $\hat{T}_{\mathbf{l}}F(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}+\mathbf{l})$.

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

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: $c(\mathbf{R}_1)c(\mathbf{R}_2) = c(\mathbf{R}_1+\mathbf{R}_2)$.

3 (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 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}+\mathbf{R})$.

4. [*12 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 3. Die Bestimmung der $\varphi_k(\mathbf{x})$ erfolgt über das Hartree-Fock-Verfahren.

7 (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 $\langle\Phi|\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_l^\dagger\hat{a}_{l'}\hat{a}_{m'}|\Phi\rangle$

5 (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.

Thierry Fredrich, E2 6, Zi.4.27 — thierry@lusi.uni-sb.de
Johannes Sicks, E2 6, Zi.4.24 — johannes@lusi.uni-sb.de