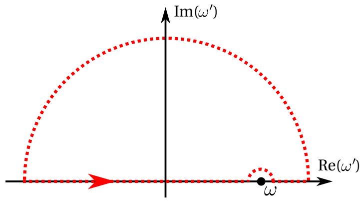
Bitte werfen Sie Ihre Lösung bis zum 15.05.2019 um 12 Uhr in das Postfach von Prof. Dr. Heiko Rieger im Erdgeschoss von Gebäude E2 6 ein. Die Abgabe sollte in Zweiergruppen erfolgen.

1. [*9 Punkte*] **Kramers-Kronig-Relationen**

6 (a) Die Kausalität bedingt, dass die Suszeptibilität $\chi_{AB}(\omega)$ in der oberen Halbebene analytisch ist. Betrachten Sie das Integral

$$\int_C d\omega' \, \frac{\chi_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega},$$

über die in der Abbildung dargestellte, geschlossene Kurve C.



Leiten Sie somit die aus der Vorlesung bekannten Kramers-Kronig-Relationen her:

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \, \frac{\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega}$$
$$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \, \frac{\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

Nehmen Sie dazu an, dass $\chi_{AB}(\omega)$ im Unendlichen hinreichend stark abfällt.

3 (b) Zeigen Sie, dass

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) = \frac{2}{\pi}\,\mathrm{P}\int_{0}^{\infty} d\omega' \, \frac{\omega'\,\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}$$
$$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega) = -\frac{2}{\pi}\,\mathrm{P}\int_{0}^{\infty} d\omega' \, \frac{\omega\,\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}$$

gilt, falls $\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega)$ eine gerade und $\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)$ eine ungerade Funktion ist für reelle ω.

2. [*11 Punkte*] **Dynamische Spin-Suszeptibilität**

Wir betrachten einen quantenmechanischen Spin in einem statischen Magnetfeld $\boldsymbol{B}_0 = B_0 \boldsymbol{e}_z$. Das magnetische Moment $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hat{\boldsymbol{S}}$ ist über den dreidimensionalen Spinoperator $\hat{\boldsymbol{S}}$ bestimmt. Im Folgenden untersuchen wir die Antwort der Spin-Polarisation $\langle \hat{S}_x(t)\rangle$, $\langle \hat{S}_y(t)\rangle$ auf ein zur Zeit $t' = 0$ adiabatisch eingeschaltetes, oszillierendes Feld

$$\boldsymbol{B}_s(t) = B_s \cos(\omega t) \boldsymbol{e}_x.$$

1 (a) Bestimmen Sie den Hamiltonian des Systems

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{B}(t)$$

und identifizieren Sie den Störterm $\hat{H}_s$.

4 (b) Berechnen Sie die transversale Suszeptibilität

$$\chi_{\hat{S}_x\hat{S}_x}(t) = \frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle[\hat{S}_x(t), \hat{S}_x(0)]\rangle, \qquad \chi_{\hat{S}_x\hat{S}_x}(z) = \int_0^\infty dt\, \chi_{\hat{S}_x\hat{S}_x}(t) e^{izt}$$

und die Antwort der Spinpolarisation $\langle \hat{S}_x(t)\rangle$.

4 (c) Bestimmen Sie analog $\chi_{\hat{S}_y\hat{S}_x}(t)$ und $\langle \hat{S}_y(t)\rangle$.

2 (d) Interpretieren Sie das Ergebnis und führen Sie für $\langle \hat{S}_x(t)\rangle$ und $\langle \hat{S}_y(t)\rangle$ den statischen Limes $\omega \to 0$ aus.

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. [*8 Punkte*] **Lineare Atomkette**

Wir betrachten eine lineare Atomkette der Länge N mit periodischen Randbedingungen, deren Atome alle die gleiche Masse M haben und deren Ruhelagen sich im Abstand a voneinander befinden. q_l sei die Abweichung des l-ten Atoms aus der Ruhelage. Es werden nur longitudinale Auslenkungen betrachtet. Die Kopplung zwischen den Atomen werde durch harmonische Kräfte mit der Federkonstante K beschrieben. Die (klassische) Hamiltonfunktion der linearen Kette mit $q_{N+1} = q_1$ lautet also:

$$H = \sum_l \frac{p_l^2}{2M} + \frac{K}{2}\sum_l (q_l - q_{l+1})^2 \quad .$$

4 (a) Zeigen Sie, dass die allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung

$$M\ddot{q}_l(t) = K\left(q_{l+1}(t) + q_{l-1}(t) - 2q_l(t)\right)$$

lautet

$$q_l(t) = \sum_k \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{\imath kla} e^{-\imath\omega_k t} A_k + \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-\imath kla} e^{\imath\omega_k t} A_k^*\right) \tag{1}$$

mit $\omega_k = 2\sqrt{K/M}|\sin(\frac{ka}{2})|$ und $k = 2\pi\frac{n}{Na}$ mit $-\frac{N}{2} \leq n < \frac{N}{2}$.

Hinweis: Nutzen Sie den Ansatz $q_l(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{\imath kla} B_k(t)$ mit $B_k(t) = e^{-\imath\omega_k t} A_k$. Hieraus ergibt sich die Dispersionsrelation für ω_k. Die Diskretisierung der k-Werte folgt aus den periodischen Randbedingungen.

4 (b) Der Impuls ist gegeben durch

$$p_l(t) = \dot{q}_l(t)\cdot M = \sum_k \left(-\imath\omega_k M\frac{1}{\sqrt{N}} e^{\imath kla} e^{-\imath\omega_k t} A_k + \imath\omega_k M\frac{1}{\sqrt{N}} e^{-\imath kla} e^{\imath\omega_k t} A_k^*\right) \quad . \tag{2}$$

Zeigen Sie, dass durch Einsetzen von $q_l(t)$ und $p_l(t)$ die Hamiltonfunktion wie folgt geschrieben werden kann:

$$H = \sum_k M\omega_k^2 \left(B_k^*(t)B_k(t) + B_k(t)B_k^*(t)\right) \tag{3}$$

Hinweis: Es gilt $\sum_l e^{\imath kla} e^{\imath k'la} = N\delta_{k,-k'}$ und $\omega_k = \omega_{-k}$.

4. [*12 Punkte*] **Quantentheoretische Behandlung der linearen Atomkette**

4 (a) Wir definieren $b_k(t) = \sqrt{\frac{2M\omega_k}{\hbar}} B_k(t)$ und schreiben die Zeitabhängigkeit nicht mehr explizit im Folgenden. Damit lassen sich die generalisierten Koordinaten schreiben als:
$q_l = \sum_k \sqrt{\hbar/(2MN\omega_k)}(b_k + b_{-k}^*)e^{\imath kla}$ und $p_l = -\imath\sum_k \sqrt{(\hbar M\omega_k)/(2N)}(b_k - b_{-k}^*)e^{\imath kla}$.
Zeigen Sie, dass gilt:

$$b_k = \sum_l \left(\sqrt{\frac{M\omega_k}{2\hbar N}} q_l + \imath\sqrt{\frac{1}{2\hbar M\omega_k N}} p_l\right) e^{-ikla} \tag{4}$$

$$b_k^* = \sum_l \left(\sqrt{\frac{M\omega_k}{2\hbar N}} q_l - \imath\sqrt{\frac{1}{2\hbar M\omega_k N}} p_l\right) e^{ikla} \tag{5}$$

4 (b) Nun gehen wir über zur quantenmechanischen Beschreibung der linearen Kette. Die Koordinaten q_l und Impulse p_l sind in der klassischen Mechanik kanonisch konjugierte Variablen, also werden sie in der Quantenmechanik durch kanonisch konjugierte Operatoren ersetzt, für die dann $[\hat{p}_l, \hat{q}_l] = \frac{\hbar}{\imath}$ gilt. Alle anderen Kommutatoren verschwinden: $[\hat{p}_l, \hat{q_{l'}}] = 0$ für $l \neq l'$, $[\hat{q}_l, \hat{q_{l'}}] = [\hat{p}_l, \hat{p_{l'}}] = 0$ für alle l,l'. Entsprechend werden die Amplituden b_k und b_k^* durch Operatoren $\hat{b_k}$ und $\hat{b}_k^+$ ersetzt. Zeigen Sie, dass dann aus (4) und (5) folgt:

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^+] = \delta_{k,k'},\ [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^+, \hat{b}_{k'}^+] = 0.$$

Die Operatoren $\hat{b}_k^+$ und $\hat{b}_k$ sind also bosonische Erzeuger und Vernichter.

4 (c) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator der linearen Kette $\hat{H} = \sum_l \frac{\hat{p}_l^2}{2M} + \frac{K}{2}\sum_l (\hat{q}_l - \hat{q}_{l+1})^2$ mit den Operatoren $\hat{b}_k$ und $\hat{b}_k^+$ geschrieben werden kann als

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k(\hat{b}_k^+\hat{b}_k + \frac{1}{2}) \quad .$$

Hinweis: Verwenden Sie das Resultat (3) aus Aufgabe 3.

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