6. Übung

Theoretische Physik
Universität des Saarlandes
Prof. Dr. Heiko Rieger
Dr. Julien Randon-Furling

Abgabe: bis zum *23.Nov.2009, 10:00 Uhr* im Postfach von Prof. Rieger

1 Freie Fermionen bei $T = 0$: Paarkorrelationsfunktion

Gegeben sei ein System von N nicht wechselwirkenden Elektronen in einem Volumen V. Mit $n = N/V$ bezeichnen wir die durchschnittliche Elektronendichte und $|\phi_0\rangle$ soll der Grundzustand des Systems sein. Die Paarverteilungsfunktion $g_{\sigma\sigma'}(\underline{r} - \underline{r}')$, mit Spinindizes σ, σ', ist definiert durch

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\underline{r} - \underline{r}') = \langle\phi_0|\psi^\dagger_\sigma(\underline{r})\psi^\dagger_{\sigma'}(\underline{r}')\psi_{\sigma'}(\underline{r}')\psi_\sigma(\underline{r})|\phi_0\rangle, \tag{6.1}$$

dabei bezeichnet $\psi^\dagger_\sigma(\underline{r})$ den mit dem fermionischen Feld verknüpften Erzeugungsoperator.
1) Zeigen Sie unter Ausnutzung der Antikommutatorrelation, dass

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\underline{r} - \underline{r}') = \langle\phi_0|\psi^\dagger_\sigma(\underline{r})\psi_\sigma(\underline{r})\psi^\dagger_{\sigma'}(\underline{r}')\psi_{\sigma'}(\underline{r}')|\phi_0\rangle - \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\underline{r} - \underline{r}')\langle\phi_0|n_\sigma(\underline{r})|\phi_0\rangle, \tag{6.2}$$

mit $n_\sigma(\underline{r}) = \psi^\dagger_\sigma(\underline{r})\psi_\sigma(\underline{r})$.

2) Zeigen Sie:

$$g_{\sigma\sigma'}(\underline{r} - \underline{r}') = 1 \quad , \quad \text{für} \quad \sigma \neq \sigma'. \tag{6.3}$$

3) Zeigen Sie:

$$g_{\sigma\sigma}(\underline{r} - \underline{r}') = 1 - \frac{9}{(p_F|\underline{r} - \underline{r}'|)^6}\left(\sin(p_F|\underline{r} - \underline{r}'|) - p_F|\underline{r} - \underline{r}'|\cos(p_F|\underline{r} - \underline{r}'|)\right)^2, \tag{6.4}$$

mit der Fermiwellenzahl p_F.

Hinweis : Nutzen Sie den in der Vorlesung gegebenen Ausdruck für die Zwei-Punkt Korrelationsfunktion $G_\sigma(\underline{r} - \underline{r}') = \langle\phi_0|\psi^\dagger_\sigma(\underline{r}')\psi_\sigma(\underline{r})|\phi_0\rangle$.

2 Hartree-Fock Näherung für wechselwirkende Fermionen

Gegeben sei der Hamiltonoperator, welcher N durch das Coulombpotential wechselwirkende Elektronen beschreibt ($\hbar = 1$):

$$H = \sum_{k,\sigma} \frac{k^2}{2m} a^\dagger_{k,\sigma} a_{k,\sigma} + \frac{e^2}{2V} \sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi}{q^2} a^\dagger_{k+q,\sigma} a^\dagger_{k-q,\sigma'} a_{k',\sigma'} a_{k',\sigma}, \tag{6.5}$$

mit Erzeugungsoperator $a^\dagger_{k,\sigma}$ und Vernichtungsoperator $a_{k,\sigma}$, welche die für Fermionen übliche Antikommutatorrelation erfüllen. $1/q^2$ ist die Fouriertransformierte des Coulombpotentials $\propto 1/r$ in drei Dimensionen.

1) Berechnen Sie den Grundzustand $|\phi_0\rangle$ des nicht wechselwirkenden Systems (Sommerfeld Gas) als Funktion der auf den Vakuumzustand $|0\rangle$ wirkenden Erzeuger- und Vernichtungsoperatoren.

In erster Ordnung Störungstheorie ist die Grundzustandsenergie des wechselwirkenden System gegeben durch:

$$\langle\phi_0|H|\phi_0\rangle = E^{(0)} + E^{(1)} \tag{6.6}$$

$$E^{(0)} = \sum_{k,\sigma} \frac{k^2}{2m}\langle\phi_0|a^\dagger_{k,\sigma} a_{k,\sigma}|\phi_0\rangle$$

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{2V} \sum_{k,k',q\neq 0,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi}{q^2}\langle\phi_0|a^\dagger_{k+q,\sigma} a^\dagger_{k-q,\sigma'} a_{k',\sigma'} a_{k',\sigma}|\phi_0\rangle. \tag{6.7}$$

2) Berechnen Sie $E^{(0)}$ und zeigen Sie, dass:

$$E^{(0)} = \frac{3}{5} N e_F, \tag{6.8}$$

mit der Fermienergie $e_F = p_F^2/(2m)$.

3) Zeigen Sie

$$E^{(1)} = -\frac{e^2}{2V} \sum_{k,q\neq 0,\sigma} \frac{4\pi}{q^2} n_{k+q,\sigma} n_{k,\sigma}, \tag{6.9}$$

mit $n_{k,\sigma} = a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}$.

4) Verifizieren Sie folgende Identität:

$$\begin{aligned} -\frac{4\pi e^2}{V} \int d^3\underline{k}' \frac{1}{|\underline{k} - \underline{k}'|^2} \Theta(p_F - p) &= -\frac{2e^2}{\pi} p_F F\left(\frac{k}{p_F}\right) \\ F(x) &= \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \log\left|\frac{1+x}{1-x}\right|, \end{aligned} \tag{6.10}$$

wobei $\Theta(x)$ die Heavy-Side-Funktion bezeichnet.

5) Nutzen Sie Relation (6.10) um für$E^{(1)}$ mit Hilfe von Gl. (6.9) folgendes zu zeigen:

$$E^{(1)} = -N \frac{3}{4} \frac{e^2 p_F}{\pi}. \tag{6.11}$$