Übungen zur Quantentheorie der Vielteilchensysteme

Aufgabe 1 — Quantenstatistischer Erwartungswert
Es sei

$$H = H_0 + \lambda A$$

mit einem hermiteschen Operator A, der nicht notwendigerweise mit dem Hamilton-Operator kommutiert.

Zeigen Sie, dass

$$\langle A \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = -\frac{\partial}{\partial \lambda} k_B T \ln \mathsf{Sp}\, e^{-\beta(H-\mu N)} \quad !$$

Aufgabe 2 — Kronecker-Delta
Betrachten Sie ein endliches Gitter, dass in einem Spat eingeschlossen ist, der von den Vektoren $L_1\mathbf{a}_1$, $L_2\mathbf{a}_2$ und $L_3\mathbf{a}_3$ aufgespannt wird. Die $\mathbf{a}_s$ $(s = 1, 2, 3)$ sind dabei die Basisvektoren einer Einheitszelle des Gitters und L_s sind (grosse) natürliche Zahlen. $L = L_1L_2L_3$ ist dann die Anzahl der Einheitszellen des Gitters. Das Systemvolumen ist $V = LV_{\mathrm{EZ}} = L\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3$.

a) Betrachten Sie ebene Wellen $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. Welche erlaubten $\mathbf{k}$-Werte ergeben sich bei periodischen Randbedingungen der Form:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \stackrel{!}{=} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + L_s\mathbf{a}_s) \qquad s = 1, 2, 3 \text{ ?}$$

Schreiben Sie $\mathbf{k}$ als Linearkombination von Basisvektoren des reziproken Gitters $\mathbf{b}_r$, $r = 1, 2, 3$. Welche Koeffizienten sind erlaubt?

b) Nutzen Sie dieses Ergebnis, um für ein $\mathbf{k}$ aus der durch $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ und $\mathbf{b}_3$ aufgespannten Einheitszelle des reziproken Gitters den Ausdruck

$$\frac{1}{L} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}$$

zu berechnen! $\mathbf{R}_i = \sum_s n_s\mathbf{a}_s$ mit ganzen Zahlen $n_s = 0, ..., L_s - 1$ sind hier die Vektoren des direkten Gitters.

c) Beweisen Sie für zwei (erlaubte) Wellenvektoren $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$ aus der Einheitszelle des reziproken Gitters, dass

$$\frac{1}{L} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_i} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{ !}$$

d) Beweisen Sie für zwei direkte Gittervektoren $\mathbf{R}_i$, $\mathbf{R}_j$, dass

$$\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}^{\mathrm{rez.EZ}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = \delta_{ij} \text{ !}$$