Übungen zur Quantentheorie der Vielteilchensysteme

Aufgabe 7 — Doppelbesetzung
Zeigen Sie für Spin-1/2-Fermionen ($\varepsilon = -1$), dass

$$0 \leq \langle d_i \rangle \leq 1$$

wobei $d_i = \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$ die Doppelbesetzung bezeichnet.

Aufgabe 8 — lokaler Spin
Für ein Gittermodell sei die Orthonormalbasis des Ein-Teilchen-Hilbert-Raums durch $\{|i\sigma\rangle\}$ gegeben, wobei i die Plätze eines Gitters indiziert und $\sigma =\uparrow, \downarrow$.
a) Verifizieren Sie für die Observable "lokaler Spin" $\boldsymbol{S}_{i\mu} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'} c^\dagger_{i\sigma}\sigma^{(\mu)}_{\sigma\sigma'}c_{i\sigma'}$ (mit $\mu = x, y, z$ und $\sigma^{(\mu)}$: Pauli-Matrizen) die Drehimpulsalgebra

$$[S_{ix}, S_{iy}]_- = iS_{iz} \qquad \text{(und zyklische Vertauschungen)} \quad !$$

b) Berechnen Sie $\boldsymbol{S}_i^2$!

Aufgabe 9 — Teilchenzahlerhaltung
Zeigen Sie, dass die (Gesamt-)Teilchenzahl für einen allgemeinen Hamilton-Operator der Form

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta}c^\dagger_\alpha c_\beta + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta}c^\dagger_\alpha c^\dagger_\beta c_\delta c_\gamma$$

mit beliebigen Matrixelementen $t_{\alpha\beta}$ und $U_{\alpha\beta\delta\gamma}$ eine Erhaltungsgröße ist!

Aufgabe 10 — 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. $L = L_1 L_2 L_3$ 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

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