Übungen zur Quantenmechanik III: Vielteilchenphysik

Aufgabe 7 — 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 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kr})$. Welche erlaubten $\mathbf{k}$-Werte ergeben sich bei periodischen Randbedingungen der Form:

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

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

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

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

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

Aufgabe 8 — Coulomb-Wechselwirkung im reziproken Raum
Gegeben ist der folgende Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij}c^\dagger_{i\sigma}c_{j\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\sum_{\sigma\sigma'} U_{ijkl}c^\dagger_{i\sigma}c^\dagger_{j\sigma'}c_{l\sigma'}c_{k\sigma}$$

mit

$$t_{ij} = \langle i\sigma | H_1 | j\sigma \rangle \qquad U_{ijkl} = \langle i\sigma, j\sigma' | H_2 | k\sigma, l\sigma' \rangle$$

wobei i die Plätze eines Gitters bezeichnet.

Führen Sie die Fourier-Transformation in den reziproken Raum durch, und geben Sie den Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung bezüglich der ONB $\{|\mathbf{k}\sigma\rangle\}$ an! Welche Vereinfachungen ergeben sich durch die Translationsinvarianz?

Aufgabe 9 — Feldoperatoren

Gegeben ist ein Coulomb-wechselwirkendes System von spinlosen Teilchen im äußeren Potenzial $V(\mathbf{r})$. Begründen Sie die folgende Darstellung des Hamilton-Operators:

$$\begin{aligned} H = & \int d^3r\ \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r'\ \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

indem Sie von der allgemeinen Darstellung von Operatoren in zweiter Quantisierung ausgehen und auf die Ortsdarstellung spezialisieren!

Aufgabe 10 — Trotter-Zerlegung

Zeigen Sie die Gültigkeit der Trotter-Zerlegung

$$\exp((A+B)/m) = \exp(A/m)\exp(B/m) + \mathcal{O}(1/m^2)$$

für beliebige lineare Operatoren A und B! (Anleitung: Betrachten Sie die Taylor-Entwicklung der Funktion $F(x) = e^{xA}e^{-x(A+B)}e^{xB}$!)

Aufgabe 11 — Ω konkav

Es sei $H = H_0 + \lambda A$ mit H_0 und A hermitesch aber sonst beliebig. Es gilt mit $\beta = 1/T, A(\tau) = e^{\mathcal{H}\tau}Ae^{-\mathcal{H}\tau}, \mathcal{H} = H - \mu\hat{N}, \Omega = -T\ln \mathrm{Sp}\, e^{-\beta\mathcal{H}}$:

$$\frac{\partial^2\Omega}{\partial\lambda^2} = \beta\langle A\rangle^2 - \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau)A(0)\rangle = \frac{\partial\langle A\rangle}{\partial\lambda} \qquad \text{(s. Vorlesung)}$$

Zeigen Sie damit, dass $\dfrac{\partial^2\Omega}{\partial\lambda^2} \leq 0$!

Anleitung: 1) Definieren Sie $(A,B) = \beta^{-1}\int_0^\beta d\tau \langle B(0)A(\tau)^\dagger\rangle$! 2) Zeigen Sie: $(\cdot,\cdot)$ ist ein Skalarprodukt! 3) Werten Sie die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung für $A = 1$ aus!