Übungen zur Quantentheorie der Vielteilchensysteme

Aufgabe 11 — 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 12 — 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:

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

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 13 — 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 $\{|\boldsymbol{k}\sigma\rangle\}$ an! Welche Vereinfachungen ergeben sich durch die Translationsinvarianz?

Leiten Sie die Form der Wechselwirkungsparameter im $\boldsymbol{k}$-Raum her für den Spezialfall

$$U_{ijkl} = \delta_{ij}\delta_{ik}\delta_{il}U \ ,$$

also für eine rein lokale Wechselwirkung!

Aufgabe 14 — Zeitabhängiger Vernichter
Beweisen Sie (durch Taylor-Entwicklung von $f(\lambda) = e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}$ um $\lambda = 0$), dass

$$e^{\lambda A}Be^{-\lambda A} = e^{-\lambda L_A}B$$

für zwei beliebige lineare Operatoren A, B, für $\lambda \in \mathbb{C}$ und $L_A(X) = [X, A]_-$!

Nutzen Sie dieses Resultat, um die Zeitabhängigkeit des Vernichters $c_\alpha(t)$ im Heisenberg-Bild zu berechnen. Nehmen Sie dazu an, dass der Hamilton-Operator ein Ein-Teilchen-Operator ist:

$$H = \sum_m \varepsilon_m c_m^\dagger c_m \ .$$

Gibt es hier Unterschiede zwischen Fermionen und Bosonen?

Aufgabe 15 — Trotter-Zerlegung
Zeigen Sie die Gültigkeit der Trotter-Zerlegung

$$\exp(x(A + B)) = \exp(xA)\exp(xB) + \mathcal{O}(x^2)$$

für beliebige lineare Operatoren A und B! x ist eine reelle Zahl.