Theorie der Kondensierten Materie – Übungen

Problem 13 — 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 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kr})$. 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

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

Problem 14 — 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!

Problem 15 — Mean-Field-Theorie des Hubbard-Modells

Zeigen Sie durch Spezialisierung des allgemeinen Resultats auf das Hubbard-Modell, dass der optimale Hamiltonian des Referenzsystems im Rahmen statischer Mean-Field-Theorie (Hartree-Fock) durch

$$H' = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} U \langle n_{i-\sigma} \rangle) c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$$

gegeben ist!

Problem 16 — Atomarer Limes

Gegeben ist das Hubbard-Modell im atomaren Limes,

$$H = \epsilon_0 \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i-\sigma} \ .$$

Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme und das großkanonische Potenzial!

Welche Werte nimmt die Entropie (abhängig von den Modellparametern) in den Grenzfällen $T \to \infty$ und $T \to 0$ an?