Prof. Dr. Tobias Brandes
Dr. Clive Emary
Dipl. Phys. Arash Azhand
Dipl. Phys. Mathias Hayn

7. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Fr. 9.12.2011 11:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 17 (3 Punkte): *Allgemeine Baker–Campbell–Hausdorff-Formel*

Zeigen Sie, dass für zwei lineare Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ gilt:

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\hat{A},\hat{B}\right]_n, \tag{1}$$

wobei der 'Multikommutator' rekursiv durch

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_0 = \hat{B} \text{ und } \left[\hat{A},\hat{B}\right]_n = \left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]_{n-1}\right] \tag{2}$$

definiert ist.

Aufgabe 18 (3 Punkte): *Berechnung von Kommutatoren*

Zeigen Sie, dass

$$[\hat{c}_\alpha^\dagger, \hat{c}_\beta^\dagger\,\hat{c}_\gamma] = -\hat{c}_\beta^\dagger\,\delta_{\alpha,\gamma} \quad \text{und}$$
$$[\hat{c}_\alpha^\dagger\,\hat{c}_\beta, \hat{c}_\gamma^\dagger\,\hat{c}_\delta] = \hat{c}_\alpha^\dagger\,\hat{c}_\delta\,\delta_{\beta,\gamma} - \hat{c}_\gamma^\dagger\,\hat{c}_\beta\,\delta_{\alpha,\delta}$$

gilt, wobei die Operatoren $\hat{c}_\alpha$, $\hat{c}_\alpha^\dagger$ kanonischen Antikommutator-Relationen genügen. Was ändert sich an diesen Ausdrücken, wenn die Operatoren kanonischen *Kommutator*-Relationen unterliegen?

Aufgabe 19 (4 Punkte): *Feldoperatoren*

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass der Hamilton-Operator eines Vielteilchensystems in „zweiter Quantisierung" die Form

$$\hat{H} = \sum_{\mu,\nu}\langle\mu|\,\hat{h}\,|\nu\rangle\;\hat{a}_\mu^\dagger\,\hat{a}_\nu + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\mu,\nu\\ \mu',\nu'}}\langle\mu,\nu|\,\hat{v}\,|\mu',\nu'\rangle\;\hat{a}_\mu^\dagger\,\hat{a}_\nu^\dagger\,\hat{a}_{\mu'}\,\hat{a}_{\nu'} \tag{3}$$

hat. Hier sind μ, ν, μ' und ν' beliebige Quantenzahlen, deren Einteilchen-Zustände $|\mu\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, $\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}})$ ist der Einteilchen-Hamilton-Operator, $\hat{v}$ ist ein Zweiteilchen-Operator und $\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\mu$ sind Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Teilchen im Zustand $|\mu\rangle$.
Mit Hilfe einer unitären Transformation lassen sich die Erzeuger und Vernichter zu der Einteilchen-Basis $|\mu\rangle$ durch Erzeuger und Vernichter einer zweiten Einteilchen-Basis $|a\rangle$ darstellen. Sind Letztere die Eigenzustände des Einteilchen-Ortsoperators $\hat{\mathbf{x}}$, dann gilt

$$\hat{a}_\mu = \int \mathrm{d}^3x\,\varphi_\mu^*(\mathbf{x})\,\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \tag{4}$$

mit den sogenannten Feldoperatoren $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ und dem vollständigen Orthonormalsystem $\varphi_\nu(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}\,|\nu\rangle$.

(a) Invertieren Sie die Gleichung (4) und leiten Sie damit die Definiton der Feldoperatoren $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ aus dem Skript her.

(b) Benutzen Sie die Gleichung (4) für den Feldoperator $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ oder das Ergebnis aus Teilaufgabe (a), um den Hamilton-Operator im Ortsraum darzustellen. D.h., drücken Sie $\hat{H}$ durch die Feldoperatoren anstatt durch die Erzeuger und Vernichter $\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\mu$ aus.

(c) Verwenden Sie nun die ebenen Wellen des Impulsoperators als die Einteilchen-Basis und zeigen Sie damit, dass die Fourier-Transformierte der Teilchendichte $\hat{n}(\mathbf{x}) = \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\,\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ die Darstellung $\hat{n}(\mathbf{p}) = \int \mathrm{d}^3 q\, \hat{a}_{\mathrm{q}}^\dagger\, \hat{a}_{\mathrm{q+p}}$ hat.

Aufgabe 20 (10 Punkte): *Hartree–Fock-Theorie im Potentialkasten*

The Hartree–Fock (HF) approximation consists of writing the ground state of the N-particle Hamiltonian $H = \sum_{i=1}^N T_i + \sum_{i<j}^N v(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|)$ with $T_i = -\hbar^2/(2m)\nabla_i^2$ as the single determinant $\Phi_0 = (N!)^{-1/2}\mathrm{det}_{n_\mathbf{k}}\left[\phi_\mathbf{k}(\mathbf{r})\right]$ with occupation numbers $n_\mathbf{k} = 0$ or 1 such that $\sum_\mathbf{k} n_\mathbf{k} = N$ and with single-particle orbitals $\phi_\mathbf{k}$ that satisfy the HF equations

$$\begin{aligned} T_1\phi_\mathbf{k}(\mathbf{r}_1) + \sum_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r}_2 |\phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_2)|^2 v(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)\phi_\mathbf{k}(\mathbf{r}_1) \\ - \sum_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r}_2 \phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}_2) v(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)\phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_1)\phi_\mathbf{k}(\mathbf{r}_2) = \epsilon_\mathbf{k}\phi_\mathbf{k}(\mathbf{r}_1). \end{aligned} \tag{5}$$

In this problem we shall consider N *spinless* fermions in a box of volume V with periodic boundary conditions.

(a) Show that, in the limit that the size of the box is much larger than the range of the interaction, the plane-wave functions $\phi_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = V^{-1/2}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ are eigensolutions of Eq. (5) and determine $\epsilon_\mathbf{k}$.

(b) Show that with this choice of plane-waves the Hartree-Fock energy $E = \langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle$ can be written as $E = \langle T\rangle + \langle v\rangle_\mathrm{D} - \langle v\rangle_\mathrm{E}$ with

$$\begin{aligned} \langle T\rangle &= \sum_\mathbf{k} n_\mathbf{k}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \\ \langle v\rangle_\mathrm{D} &= \frac{N^2}{2V}\int d\mathbf{r} v(|\mathbf{r}|), \\ \langle v\rangle_\mathrm{E} &= \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} n_\mathbf{k} n_{\mathbf{k}'}\int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} v(|\mathbf{r}|) \end{aligned} \tag{6}$$

(c) Assume a contact interaction of the form $v(r) = v_0\delta(r)$ and perform the above integrals. Which choice of occupation numbers $n_\mathbf{k}$ then minimizes the HF energy and what is its minimum value?

(d) Discuss this result in comparison with the non-interacting problem. What can be said in general when the interaction has a finite range?