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

9. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Fr. 6.1.2012 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 24 (6 Punkte): *Bogoliubov Transformation of the mean-field BCS Hamiltonian*
The BCS Hamiltonian reads

$$H_{\mathrm{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad \xi_{-\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}},\ V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V^*_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \tag{1}$$

(a) Write down the mean-field approximation to H_{BCS}. Express your answer in terms of the gap $\Delta_{\mathrm{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle$.

(b) Use the Bogoliubov Transformation

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^*_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v^*_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

to diagonalise the mean-field BCS Hamiltonian. This involves determining the coefficients $u_{\mathbf{k}}$ and $v_{\mathbf{k}}$. The operators $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}$ satisfy canonical anti-commutation relations.

Aufgabe 25 (9 Punkte): *Green'sche Funktionen im Tight-Binding-Modell (TBM)*
In dieser Aufgabe soll die Green'sche Funktion für das Tight-Binding-Hamiltonian (TBH) betrachtet werden. Die TBH ist ein Element aus der Klasse von periodischen Hamiltonians. Das sind Hamiltonians, die invariant bleiben unter Translationen mit einem Vektor $\mathbf{l}$, wobei die Menge $\{\mathbf{l}\}$ einen regulären Gitter im d-dimensionalen Raum bilden. Der Hamiltonian des TBM ist gegeben durch

$$H = \sum_l \epsilon_l |l\rangle\langle l| + V \sum_{\langle lm \rangle} |l\rangle\langle m|, \tag{3}$$

mit den Annahmen: (i) Nächste-Nachbar-Kopplung, (ii) $\langle l|m\rangle = \delta_{lm}$. Für die Eigenfunktionen und den Eigenenergien des TBH gilt

$$|k\rangle = \sum_l c_l |l\rangle = c_0 \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} |l\rangle, \quad E(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + V \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} \tag{4}$$

Die Green'sche Funktion für das TBH ist definiert durch

$$\hat{G}(z) = \sum_k \frac{|k\rangle\langle k|}{z - E(\mathbf{k})}, \quad G(l, m; z) = \langle l|\hat{G}(z)|m\rangle \tag{5}$$

(a) Zeigen Sie, dass für die diagonalen Matrixelemente der Green'schen Funktion des TBH $G(l, l; z) \underset{z\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{z}$ gilt.

(b) Bestimmen Sie für einen 1D-Gitter die Green'sche Funktion $G^+(l, m; z)$ und zeigen Sie, dass die Zustandsdichte pro Gitterpunkt gegeben ist durch

$$\rho(E) = \frac{\theta\left(B - |E - \epsilon_0|\right)}{\pi\sqrt{B^2 - (E - \epsilon_0)^2}}, \tag{6}$$

wobei $B = 2|V|$.

(c) Zeigen Sie nun für einen quadratischen Gitter, dass die diagonalen Matrixelemente der Green'schen Funktion und die Zustandsdichte pro Gitterpunkt gegeben sind durch

$$G(l, l; z) = \frac{2}{\pi(z-\epsilon_0)}\mathcal{K}(\lambda) \tag{7}$$

$$\rho(E) = \frac{2}{\pi^2 B}\theta\left(B - |E-\epsilon_0|\right)\mathcal{K}\left(\sqrt{1-\frac{(E-\epsilon_0)^2}{B^2}}\right) \tag{8}$$

Hierbei sind $\mathcal{K}$ das vollständige elliptische Integral 1. Art, $\lambda = \frac{B}{z-\epsilon_0}$ und $B = 4|V|$.

Aufgabe 26 (5 Punkte): *Hartree–Fock-Theorie für Bosonen*

In dieser Aufgabe soll die Hartree–Fock-Gleichung für ein System aus N ununterscheidbaren Bosonen hergeleitet werden. Im Gegensatz zu dem fermionischen Problem handelt es sich in der Tat nur um eine Gleichung, da der Ansatz für den Hartree–Fock-Zustand nur *ein* Ein-Teilchen-Orbital, welches wir mit λ bezeichnen, beinhaltet:

$$|\Phi_0\rangle = \sqrt{\frac{1}{N!}}\left[\hat{a}^\dagger_\lambda\right]^N |\mathrm{vac}\rangle = |\{n_\nu = 0|\nu \neq \lambda\}, n_\lambda = N\rangle\,. \tag{9}$$

Die Menge von Quantenzahlen, welche auch λ enthält, sei mit $\{\nu\}$ bezeichnet. Die Transformation der Feldoperatoren auf diesen Satz von Quantenzahlen lautet

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_\nu \varphi_\nu(\mathbf{x})\,\hat{a}_\nu. \tag{10}$$

Der Hamilton-Operator eines Systems wechselwirkender Bosonen in einem Potential $V(\mathbf{x})$ ist durch

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \tag{11}$$

mit

$$\hat{H}_1 = \int \mathrm{d}^3x\,\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\Big\}\,\hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad \text{und} \tag{12}$$

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\,\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}')\,U(\mathrm{x}-\mathrm{x}')\,\hat{\Psi}(\mathrm{x}')\,\hat{\Psi}(\mathrm{x}) \tag{13}$$

gegeben.

(a) Berechnen Sie die Erwartungswerte der Operatoren $\hat{H}_1$ und $\hat{H}_2$ im Hartree–Fock-Zustand (9).

(b) Extremalisieren Sie das Energiefunktional $E[\varphi_\lambda(\mathbf{x}), \varphi^*_\lambda(\mathbf{x})] = \langle\Phi_0|\,\hat{H}_1\,|\Phi_0\rangle + \langle\Phi_0|\,\hat{H}_2\,|\Phi_0\rangle$ unter der Nebenbedingung $N = \int \mathrm{d}^3x\,\langle\Phi_0|\,\hat{\Psi}^\dagger(\mathrm{x})\,\hat{\Psi}(\mathrm{x}\,|\Phi_0\rangle)$. Was ist die Bedeutung dieser Nebenbedingung? Leiten Sie damit die Hartree–Fock-Gleichung

$$\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) + (N-1)\int \mathrm{d}^3x'\,|\varphi_\lambda(\mathrm{x}')|^2\,U(\mathrm{x}-\mathrm{x}')\Big\}\,\varphi_\lambda(\mathrm{x}) = \mu\,\varphi_\lambda(\mathrm{x}) \tag{14}$$

mit dem Lagrange-Parameter μ her.

(c) Vergleichen Sie die Hartree–Fock-Gleichung (14) für Bosonen mit der für Fermionen aus der Vorlesung. Wie würden Sie die Hartree–Fock-Gleichung (14) lösen?