Fortgeschrittene Vielteilchentheorie (WS 2018/2019) – Blatt 13

◯ Aufgabe 32: Freies Elektronengas

Wir betrachten ein ideales (nicht-wechselwirkendes) Fermigas aus N-Teilchen in einem dreidimensionalen Kasten mit Volumen $V = L^3$. Dieses wird durch den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} \tag{1}$$

beschrieben, wobei m die Masse eines Teilchens ist. Die Ein-Teilchenlösungen haben die Form

$$\phi_{\boldsymbol{k}\sigma}(\boldsymbol{r}, s) = \frac{1}{\sqrt{V}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \chi_\sigma(s). \tag{2}$$

Hierbei bezeichnet $\boldsymbol{k}$ den Wellenvektor, $\boldsymbol{r}$ die Ortskoordinate, χ die Spinfunktion, σ den Spin und s den dazugehörigen Eigenwert. Es gelten periodische Randbedingungen, d.h.

$$\phi_{\boldsymbol{k}\sigma}(\boldsymbol{r} + L\boldsymbol{e}_i, s) = \phi_{\boldsymbol{k}\sigma}(\boldsymbol{r},s)$$

und $i \in \{1,2,3\}$.

(a) Berechnen Sie explizit (mittels erster Quantisierung) die Wellenfunktion des Grundzustandes für $N = 2$ und geben Sie dann den Grundzustand des N-Teilchensystems an. Berechnen Sie zudem die Dispersionsrelation $E(\boldsymbol{k})$. Geben Sie eine Formel für die Grundzustandsenergie des N-Teilchensystems an.

(b) Betrachten Sie den Grenzfall $V \to \infty$, $N/V = \text{const}$. In diesem Fall dürfen Sie die Summe über $\boldsymbol{k}$ durch Integrale ersetzen, d.h.

$$2\sum_{\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{k}) \to \frac{2V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\, f(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}k\, D(k) f(k) = \int \mathrm{d}E\, D(E) f(k(E)).$$

Woher kommt der Faktor 2 und $V/(2\pi)^3$ vor dem ersten Integral? Die beiden hinteren Integrale dürfen nur dann verwendet werden, wenn der Integrand nur vom Betrag $|\boldsymbol{k}|$ abhängt. Berechnen Sie die Zustandsdichte

$$D(E) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\, \delta(E - E(\boldsymbol{k})).$$

Stellen Sie anschließend eine Verbindung zwischen Teilchendichte $n = N/V$ und Fermienergie her. Wie lautet die Grundzustandsenergie des Fermigases?
Hinweis: Im Grundzustand des Fermigases nennt man die Energie zum höchsten besetzten Einteilchenzustand Fermienergie $E_\mathrm{F} = \hbar^2 k_\mathrm{F}^2/(2m)$.

(c) Nun wollen wir in den Formalismus der zweiten Quantisierung übergehen. Dazu führen wir die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger$ und $a_{\boldsymbol{k}\sigma}$ ein. Geben Sie den Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung an. Wie sieht der Grundzustand in zweiter Quantisierung aus?
Hinweis: Verwenden Sie:

$$\frac{1}{V}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{r}} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}, \quad \sum_s \chi_\sigma^*(s)\chi_{\sigma'}(s) = \delta_{\sigma,\sigma'}.$$

◯ Aufgabe 33: Two-Site Hubbard-Modell

Wir betrachten das Hubbard-Modell, dessen Hamiltonoperator durch

$$H = -t \sum_{j,\sigma} \left(c^\dagger_{j\sigma} c_{j+1\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{3}$$

gegeben ist. Hierbei entspricht t dem Hopping-Parameter, U der Coulomb-Wechselwirkung, j, i, der Summe über Gitterplätze und σ den Spinrichtungen. Im Folgenden beschränken wir uns auf lediglich 2 Gitterplätze.

(a) Wir beschränken uns zudem auf Zustände mit zwei Spin-1/2-Teilchen und verschwindender Magnetisierung $S_z = 0$. Welche Zustände sind das?

(b) Diagonalisieren Sie den Hamiltonoperator in diesem Unterraum. Plotten Sie die Energieeigenwerte in Einheiten des Hopping-Parameters $|t|$ und als Funktion des Wechselwirkungsparameters U.

(c) Schreiben Sie den Wechselwirkungsterm in Mean-Field-Näherung

$$AB = A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle AB \rangle \tag{4}$$

mit halber Füllung $\langle n \rangle = 1/2$ um und vergleichen Sie die Grundzustandsenergie mit der exakten Lösung. Fertigen Sie ebenfalls einen Plot an. Bewerten Sie die Näherung.

◯ Aufgabe 34: Relativistische Fermionen

Bei der Behandlung hochenergetischer Fermionen sind relativistische Effekte zu berücksichtigen. Die Ein-Teilchen-Energien lauten dann

$$\varepsilon(\boldsymbol{p}) = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}. \tag{5}$$

(a) Zeigen Sie, dass für die mittlere Teilchenzahl $\langle \hat{N} \rangle = \sum_i \langle \hat{n}_i \rangle$ und die innere Energie $U = \sum_i \varepsilon_i \langle \hat{n}_i \rangle$ des idealen relativistischen Fermi-Gases gilt:

$$\langle \hat{N} \rangle = (2S+1) \frac{m^3 c^3}{2\pi^2 \hbar^3} V \int_0^\infty \frac{\sinh^2 \alpha \cosh \alpha}{\exp(-\beta\mu + \beta m c^2 \cosh \alpha) + 1} \mathrm{d}\alpha \tag{6}$$

$$U = (2S+1) \frac{m^4 c^5}{2\pi^2 \hbar^3} V \int_0^\infty \frac{\sinh^2 \alpha \cosh^2 \alpha}{\exp(-\beta\mu + \beta m c^2 \cosh \alpha) + 1} \mathrm{d}\alpha \tag{7}$$

Das chemische Potential μ enthält die Ruheenergie mc^2.

(b) Werten Sie die Integrale für den Fall tiefer Temperaturen aus.