Fortgeschrittene Vielteilchentheorie (WS 2018/2019) – Blatt 12

◯ Aufgabe 29: Zweite Quantisierung

Im Folgenden betrachten wir ein System von N identischen spinlosen Teilchen mit der abstandsabhängigen Paarwechselwirkung $V_{ij} = V(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|)$. Der gesamte Hamiltonoperator ist demnach

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i,j\neq i} V_{ij}, \tag{1}$$

wobei m der Masse eines Teilchens entspricht. Dieser soll nun in zweiter Quantisierung (Erzeuger und Vernichter) umgeschrieben werden. Die dafür notwendigen Werkzeuge bezüglich der diskreten Fockdarstellung haben Sie bereits in der Vorlesung kennengelernt. Im kontinuierlichem Fall gilt

$$\begin{aligned}\sum_i A_1^{(i)} &= \iint \mathrm{d}\alpha\,\mathrm{d}\beta\ \langle\phi_\alpha|A_1|\phi_\beta\rangle\, a_\alpha^\dagger a_\beta,\\ \frac{1}{2}\sum_{i,j} A_2^{(i,j)} &= \frac{1}{2}\int\ldots\int \mathrm{d}\alpha\,\mathrm{d}\beta\,\mathrm{d}\gamma\,\mathrm{d}\delta\ \langle\phi_\alpha\phi_\beta|A_2|\phi_\gamma\phi_\delta\rangle\, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma\end{aligned}$$

wobei $A_1^{(i)}$ ein Ein-Teilchenoperator, $A_2^{(i,j)}$ ein Zwei-Teilchenoperator und $|\phi_\alpha\rangle$ ein Ein-Teilchenzustand ist. Zudem können Sie hierbei

$$\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{r}}, \qquad V(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3r\,V(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = V(-\boldsymbol{k}) \tag{2}$$

als bekannt voraussetzen. Ziel dieser Aufgabe ist es mit der kontinuierlichen Darstellung vertraut zu werden.

(a) Zeigen Sie, dass der kinetische Term auf die Form

$$\mathcal{H}_{\mathrm{kin}} = \int \mathrm{d}^3k\,\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}} \tag{3}$$

gebracht werden kann, indem Sie die kontinuierliche $\boldsymbol{k}$-Darstellung verwenden.
Hinweis: Verwenden Sie ebene Wellen, d.h.

$$\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{(2\pi)^{3/2}}.$$

(b) Gehen Sie analog für den Paarwechselwirkungsterm vor und bringen Sie ihn auf die Form

$$\mathcal{H}_{\mathrm{WW}} = \frac{1}{2}\iiint \mathrm{d}^3k\,\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}^3q\,V(\boldsymbol{q})a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}} a_{\boldsymbol{k}}. \tag{4}$$

Hinweis: Beachten Sie, dass das Matrixelement wie folgt zu verstehen ist

$$\langle\phi_\alpha\phi_\beta|A_2|\phi_\gamma\phi_\delta\rangle = \langle\phi_\alpha^{(1)}|\,\langle\phi_\beta^{(2)}|\,A_2\,|\phi_\gamma^{(1)}\rangle\,|\phi_\delta^{(2)}\rangle\,,$$

wobei der geklammerte Index auf Teilchen 1, bzw. 2 hinweist. Im Zuge Ihrer Rechnung kann es sich zudem als überaus nützlich erweisen eine Koordinatentransformation in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten zu verwenden.

(c) Sei nun der Teilchenzahloperator durch

$$N = \int \mathrm{d}^3k\,a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}} \tag{5}$$

gegeben. Zeigen Sie, dass dieser mit dem Hamiltonoperator (1) kommutiert.

◯ Aufgabe 30: Paarverteilungsfunktion für Fermionen

Im Folgenden betrachten wir nicht-wechselwirkende Fermionen, bspw. Spin 1/2 Teilchen. Diese sind auch aufgrund des Pauli-Prinzips untereinander korreliert. Bekanntermaßen verhindert dies eine identische Ortswellenfunktion zweier Femionen mit gleichem Spin, d.h. die Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass sich zwei solche Teilchen nahe kommen, ist gering. Die Paarverteilungsfunktion $g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, welche wir uns in dieser Aufgabe näher betrachten wollen, stellt somit ein Maß dieser Korrelation dar. Wird am Ort $\boldsymbol{r}$ ein einziges Teilchen aus dem Zustand $|\phi_0\rangle$ (Grundzustand) entfernt, entsteht der Zustand $|\phi'_\sigma(\boldsymbol{r})\rangle = \psi_\sigma(\boldsymbol{r})\,|\phi_0\rangle$, wobei $\psi_\sigma(\boldsymbol{r})$ ein Feldoperator der Form

$$\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} a_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{6}$$

ist. Die Paarverteilungsfunktion ist dann über die Dichteverteilung für diesen Zustand

$$\frac{n^2}{4} g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \equiv \langle\phi'_\sigma(\boldsymbol{r})|\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')|\phi'_\sigma(\boldsymbol{r})\rangle = \langle\phi_0|\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}')\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})|\phi_0\rangle \tag{7}$$

definiert. Hierbei ist n die mittlere Teilchendichte. Der Grundzustand habe die gesamte Teilchendichte $n = n_\uparrow + n_\downarrow$ und somit $n_\uparrow = n_\downarrow = n/2$.

Zunächst bestimmen wir aber die Korrelationsfunktion der Feldoperatoren im Grundzustand, die wie folgt definiert ist

$$G_\sigma(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \equiv \langle\phi_0|\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}')|\phi_0\rangle\,.$$

Diese hat die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein Teilchen am Ort $\boldsymbol{r}'$ vernichtet und am Ort $\boldsymbol{r}$ erzeugt wird.

(a) Zeigen Sie, dass die Einteilchenkorrelationsfunktion auf die folgende Form gebracht werden kann

$$G_\sigma(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{3n}{2}\frac{\sin(k_\mathrm{F}r) - k_\mathrm{F}r\cos(k_\mathrm{F}r)}{(k_\mathrm{F}r)^3}.$$

Hinweis: Führen Sie die auftauchende Summe in ein Integral über und rechnen Sie anschließend in Kugelkoordinaten. Setzen Sie hierbei $r = |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$. Beachten Sie, dass der Grundzustand nur bis zur Femienergie gefüllt und die Fermiwellenzahl für freie Fermionen durch $k_\mathrm{F}^3 = 3\pi^2 n$ gegeben ist.

(b) Drücken Sie die Paarverteilungsfunktion $g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ im Fourierraum aus, indem Sie die Definition der Feldoperatoren einsetzen.

(c) Betrachten Sie nun die beiden Fälle $\sigma \neq \sigma'$ und $\sigma = \sigma'$. Was müssen die Impulse ($\boldsymbol{k}$-Vektoren) erfüllen, dass die auftauchenden Amplituden nicht verschwinden? Wie sehen die Paarverteilungsfunktionen in beiden Fällen aus?
Hinweis: Im Fall $\sigma = \sigma'$ verbleiben Sie mit einer Summen, deren Umschreibung mittels der obigen Korrelationsfunktion $G_\sigma(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ erfolgt. Bringen Sie das Ergebnis im Fall $\sigma = \sigma'$ auf die Form

$$\frac{n^2}{4} g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{n^2}{4} - (G_\sigma(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'))^2$$

und bestimmen Sie dann $g_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$.

(d) Plotten Sie die Paarverteilungsfunktion und diskutieren Sie das Verhalten. Was versteht man in diesem Kontext unter Austauschloch, bzw. Korrelationsloch?

Aufgabe 31: Polyacetylen (10 Punkte)
Das Su-Schrieffer-Heeger-Modell, kurz SSH, beschreibt die elektronischen Eigenschaften bei niedrigen Energien von Polyacetylen. Das Modell wird hierbei über eine Kette mit jeweils zwei Gitterplätzen in der Einheitszelle, die durch A, bzw. B bezeichnet werden, definiert. Im Ortsraum ist der Hamiltonoperator des Modells durch

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[(t + \delta t)c^\dagger_{A,i}c_{B,i} + (t - \delta t)c^\dagger_{A,i+1}c_{B,i} + \text{h.c.}\right] \tag{8}$$

gegben, wobei δt die Dimerisation beschreibt und $c^\dagger_{A,i}$ der Erzeuger eines Elektrons am Gitterplatz (A,i) ist. Vergleiche hierzu Abbildung 1.

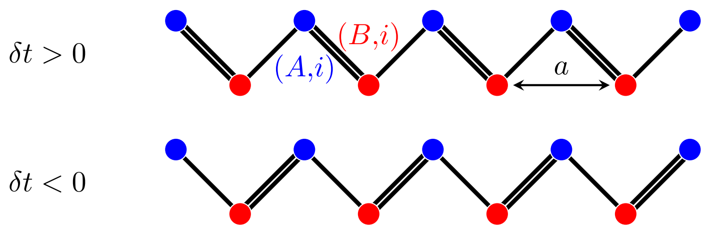

Abbildung 1: Dimerisation von Polyacetylen.

(a) Führen Sie eine Fouriertransformation für die Erzeuger und Vernichter aus und bringen Sie den Hamiltonoperator auf die Form

$$\mathcal{H} = \sum_k \begin{pmatrix} c^\dagger_{A,k} & c^\dagger_{B,k} \end{pmatrix} h(k) \begin{pmatrix} c_{A,k} \\ c_{B,k} \end{pmatrix}.$$

wobei es $h(k)$ zu bestimmen gilt. Bringen Sie diese auf die Form $h(k) = \boldsymbol{d}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ und geben Sie einen Ausdruck für $\boldsymbol{d}(k)$ an. Hierbei ist $\boldsymbol{\sigma}$ der Vektor der Pauli-Matrizen. (3 Punkte)

(b) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator $h(k)$ die folgenden Symmetrien erfüllt

(i) Zeitumkehrsymmetrie: $u_T h^T(-k) u_T^\dagger = h(+k)$,

(ii) Teilchen-Loch-Symmetrie: $u_C h^T(-k) u_C^\dagger = -h(k)$,

(iii) Untergittersymmetrie: $Sh(k) + h(k)S = 0$.

Hierbei ist $u_T = \mathbb{1}$, $u_C = \sigma_z$ und $S = u_T u_C$. Mittels der letzten Symmetrie sollten Sie in der Lage sein, zu zeigen, dass das Engiespektrum von $h(k)$ bis auf $E = 0$ symmetrisch ist, d.h. zeigen Sie, dass $\psi(-E) = S\psi(E)$, wobei ψ und E Eigenfunktion und Eigenwert zu $h(k)$ sind. (3 Punkte)

Die folgenden Aufgabenteile (c) und (d) sollen nun **numerisch** gelöst werden. Für die numerische Auswertung dürfen Sie eine Ihnen bekannte Programmiersprache, bspw. C, C++, Fortran, Python, etc. verwenden.

(c) Berechnen Sie das Energiespektrum von Hamiltonoperator (8) mit offenen Randbedingungen **numerisch** für 100 Gitterplätze. Plotten Sie das Energiespektrum als Funktion von δt. Für welche δt exisitert ein „zero energy state"? (2 Punkte)
Hinweis: Überlegen Sie sich welche Struktur der Hamiltonoperator im Orstraum hat.

(d) Im Energiespektrum sollten für $\delta t < 0$ sogenante „zero energy states" existieren, d.h. Eigenzustände $|\psi\rangle_i$ mit Eigenenergie $\varepsilon_i = 0$. Betrachten Sie nun diese Eigenzustände in der Basis

der Gitterplätze und plotten Sie die Betragsquadrate der Gewichte über dem Gitterplatz i.
Hinweis: In welcher Basis ist der Hamiltonoperator gegeben? Beachten Sie, dass zu einem Gitterplatz i beide Untergitter (A,i) und (B,i) gehören.
Es handelt sich also um die Gitterplatz aufgelöste Wahrscheinlichkeit ein Teilchen in diesem Zustand anzutreffen. Betrachten Sie die folgenden Fälle:

- Setzen Sie für ihre Rechnung $\delta t = -1$. In der englischen Literatur sind diese Zustände als „edge states“ bekannt. Warum? (1 Punkt)
- Nun für verschiedene δt. Was passiert mit den zero energy states, wenn δt größer wird? Plotten Sie für verschiedenen δt (vorzugsweise um $\delta t = 0$) ebenfalls die Gitterplatz aufgelöste Dichte der obigen Zustände. (1 Punkt)

Hinweis zur Abgabe: Geben Sie nebst den Abbildungen auch das Programm ab!