Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. König

Blatt 1: Lösungen
Besprechung 30.10.2014

---

1. Ideales Bose-Gas. (10 Punkte)

In dieser Aufgabe wiederholen wir die statistische Mechanik des idealen Bose-Gases. Der Hamilton Operator des idealen Bose Gases lautet $H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$ mit Dispersionsrelation $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}|\mathbf{k}|^2$ und $n_{\mathbf{k}}$ ist die Besetzungszahl des Zustands mit Wellenvektor $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(l_x, l_y, l_z)$ mit $l_\alpha \in \mathbb{Z}$.

Mikrozustände (Besetzungszahldarstellung)

$$\{\alpha\} = \{n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, n_{\mathbf{k}_3}, \dots, n_{\mathbf{k}_i}, \dots\} \quad , \quad n_{\mathbf{k}_i} = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Die Anordnung $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots$ wird so festgelegt, daß gilt, $\varepsilon_{\mathbf{k}_1} \leq \varepsilon_{\mathbf{k}_2}$ etc.

Energie:

$$E_\alpha = \varepsilon_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_1} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} n_{\mathbf{k}_2} + \dots = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$$

Teilchenzahl:

$$N_\alpha = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$$

Drücken Sie die folgenden thermodynamischen Größen in $d = 3$ durch Integrale über die Bose-Funktion n_B aus:

(a) Die großkanonische Zustandssumme Z_g: (2 Punkte)

Die *Bose-Funktion* ist gegeben durch

$$n_B(\varepsilon_\lambda) = \langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)] - 1}.$$

Für die *großkanonische Zustandssumme* erhalten wir

$$\begin{aligned}
Z_g &= \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-\mu N)}\right) = \sum_\alpha e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)} \\
&= \prod_{\mathbf{k}} \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\, n} \right) = \prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}} = \prod_{\mathbf{k}} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} \\
&= \prod_{\mathbf{k}} \exp\left[\ln \frac{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} \right] = \exp\left[\sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} \right] \\
&= \exp\left\{ V \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} \ln\left[1 + n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\right] \right\}.
\end{aligned}$$

(b) Das großkanonische Potential Ω ist, (2 Punkte)

$$\begin{aligned}\Omega &= -k_BT\ln Z_g = k_BTV\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\ln\left[1-e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)}\right] \qquad (1)\\ &= -k_BTV\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\ln\left[1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\right]. \qquad (2)\end{aligned}$$

(c) Die innere Energie U: (2 Punkte)

$$U=\sum_\lambda \epsilon_\lambda\langle n_\lambda\rangle = V\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon_{\mathbf{k}}n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}}).$$

(d) Die Entropie S: (2 Punkte)

$$\begin{aligned}S &= -\left.\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right|_{\mu,V} \qquad (3)\\ &= k_BV\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\ln\left[1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\right]-k_BTV\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\partial}{\partial T}\ln\left[1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\right]\\ &= k_BV\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\left\{\ln[1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})]+\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu}{k_BT}n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\right\}\\ &= k_BV\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\left\{\ln[1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})]+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\ln\left[\frac{1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})}\right]\right\}\\ &= k_BV\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\left\{[1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})]\ln[1+n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})]-n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\ln n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}})\right\}. \qquad (4)\end{aligned}$$

(e) Die Teilchenzahl N ist gegeben durch, (2 Punkte)

$$\begin{aligned}N(T,V,\mu) &= -\left.\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right|_{T,V}=\sum_\lambda\langle n_\lambda\rangle = V\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \qquad (5)\\ &= V\int \mathrm{d}\varepsilon\,\mathcal{N}(\varepsilon)n_B(\varepsilon)\,, \qquad (6)\end{aligned}$$

mit der Zustandsdichte

$$\mathcal{N}(\varepsilon)=C_3\sqrt{\varepsilon}\quad,\quad C_3=\frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}.$$

2. Zweite Quantisierung: Bose-Statistik. (10 Punkte)

Der Hamilton-Operator eines harmonischen Oszillators lautet

$$\hat H=\hbar\omega\left(\hat b^\dagger\hat b+\frac{1}{2}\right),\qquad [\hat b,\hat b^\dagger]=1.$$

Die thermische Mittelung $\langle ... \rangle$ ist durch

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\hat{O}\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right)}$$

definiert, wobei

$$\mathrm{Tr}(\hat{O}) = \sum_{m=0}^{\infty} \langle m|\hat{O}|m\rangle, \qquad |m\rangle = \frac{(\hat{b}^\dagger)^m}{\sqrt{m!}}|0\rangle.$$

Betrachten Sie den Operator

$$\hat{B} = \lambda^* \hat{b}^\dagger + \lambda \hat{b}, \qquad \lambda \in \mathbb{C}.$$

Zeigen Sie dass

$$\left\langle \exp(\hat{B}) \right\rangle = \exp\left(\frac{1}{2}\langle \hat{B}^2 \rangle\right)$$

gilt.

Lösung:

Wir verwenden die folgenden Identitäten:

$$\begin{aligned}
\hat{b}|m\rangle &= \sqrt{m}|m-1\rangle, && (7)\\
\hat{b}^\dagger|m\rangle &= \sqrt{m+1}|m+1\rangle, && (8)\\
\hat{b}^r|m\rangle &= \sqrt{m}\, b^{r-1}|m-1\rangle \\
&= [m(m-1)\dots(m-r+1)]^{1/2}|m-r\rangle && (9)\\
&= \left[\frac{m!}{(m-r)!}\right]^{1/2}|m-r\rangle, \quad r \le m, && (10)\\
\hat{b}^r|m\rangle &= 0, \quad r > m; && (11)\\
\hat{b}^\dagger\hat{b}|m\rangle &= \hat{b}^\dagger\sqrt{m}|m-1\rangle = m|m\rangle, && (12)\\
(\hat{b}^\dagger\hat{b})^r|m\rangle &= (\hat{b}^\dagger\hat{b})^{r-1}m|m\rangle = m^r|m\rangle; && (13)\\
\langle m|e^{-\beta\hbar\omega(\hat{b}^\dagger\hat{b}+1/2)}|m\rangle &= e^{-\beta\hbar\omega/2}\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-\beta\hbar\omega)^r}{r!}\langle m|(\hat{b}^\dagger\hat{b})^r|m\rangle = e^{-\beta\hbar\omega(m+1/2)}; && (14)\\
e^{\lambda^*\hat{b}^\dagger+\lambda\hat{b}} &= e^{|\lambda|^2/2}e^{\lambda^*\hat{b}^\dagger}e^{\lambda\hat{b}} \qquad \text{(Baker-Hausdorff)}; && (15)\\
\langle m|(\hat{b}^\dagger)^p\hat{b}^r|m\rangle &= 0, \quad p \neq r. && (16)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{B}^2 \rangle &= \langle(\lambda^*\hat{b}^\dagger + \lambda\hat{b})^2\rangle = (\lambda^*)^2\langle\hat{b}^\dagger\hat{b}^\dagger\rangle + \lambda^2\langle\hat{b}\hat{b}\rangle + |\lambda|^2\langle\hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger\rangle \\
&= |\lambda|^2\langle\hat{b}^\dagger\hat{b} + (1+\hat{b}^\dagger\hat{b})\rangle = 2|\lambda|^2\langle\hat{b}^\dagger\hat{b} + 1/2\rangle. && (17)
\end{aligned}$$

Die Zustandssumme lautet

$$Z = \sum_{m=0}^{\infty}\langle m|e^{-\beta\hbar\omega(\hat{b}^\dagger\hat{b}+1/2)}|m\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} x^{m+1/2} = \frac{x^{1/2}}{1-x}, \quad \text{wobei } x \equiv e^{-\beta\hbar\omega}. \qquad (18)$$

Wir berechnen zuerst

$$\begin{aligned}\langle\hat{b}^\dagger\hat{b}\rangle &= Z^{-1}\sum_{m=0}^{\infty}\langle m|e^{-\beta\hbar\omega(\hat{b}^\dagger\hat{b}+1/2)}\hat{b}^\dagger\hat{b}|m\rangle = Z^{-1}\sum_{m=0}^{\infty}x^{m+1/2}m \\ &= Z^{-1}x^{3/2}\frac{d}{dx}\sum_{m=0}^{\infty}x^m = \frac{1-x}{x^{1/2}}x^{3/2}\frac{d}{dx}\frac{1}{1-x} = \frac{x}{1-x}\ . \qquad (19)\end{aligned}$$

Weiter erhalten wir dann,

$$\begin{aligned}\left\langle\exp(\hat{B})\right\rangle &= Z^{-1}\sum_{m=0}^{\infty}\langle m|e^{-\beta\hbar\omega(\hat{b}^\dagger\hat{b}+1/2)}e^{|\lambda|^2/2}e^{\lambda^*\hat{b}^\dagger}e^{\lambda\hat{b}}|m\rangle \qquad (20)\\ &= Z^{-1}\sum_{m=0}^{\infty}\langle m|e^{-\beta\hbar\omega(\hat{b}^\dagger\hat{b}+1/2)}e^{|\lambda|^2/2}\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(\lambda^*\hat{b}^\dagger)^p}{p!}\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(\lambda\hat{b})^r}{r!}|m\rangle \qquad (21)\\ &= Z^{-1}e^{|\lambda|^2/2}\sum_{m=0}^{\infty}x^{m+1/2}\sum_{r=0}^{m}\frac{|\lambda|^{2r}}{(r!)^2}\frac{m!}{(m-r)!} \qquad (22)\\ &= Z^{-1}e^{|\lambda|^2/2}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{m=r}^{\infty}x^{m+1/2}\frac{|\lambda|^{2r}}{(r!)^2}\frac{m!}{(m-r)!} \qquad (23)\\ &= Z^{-1}e^{|\lambda|^2/2}\sum_{r=0}^{\infty}\frac{|\lambda|^{2r}}{r!}S_r\ , \qquad (24)\end{aligned}$$

wobei

$$S_r \equiv \sum_{m=r}^{\infty}x^{m+1/2}\frac{m!}{r!(m-r)!} = x^{r+1/2}\sum_{\bar{m}=0}^{\infty}x^{\bar{m}}\frac{(r+\bar{m})!}{r!\bar{m}!}. \qquad (25)$$

Wir untersuchen die folgende Summe in Gl. (25) genauer,

$$\begin{aligned}f(x) &\equiv \sum_{\bar{m}=0}^{\infty}x^{\bar{m}}\frac{(r+\bar{m})!}{r!\bar{m}!}, \qquad (26)\\ \frac{df(x)}{dx} &= \sum_{\bar{m}=1}^{\infty}x^{\bar{m}-1}\frac{(r+\bar{m})!}{r!(\bar{m}-1)!} = \sum_{\bar{m}=0}^{\infty}x^{\bar{m}}\frac{(r+\bar{m}+1)!}{r!\bar{m}!} \qquad (27)\\ &= (r+1)\sum_{\bar{m}=0}^{\infty}x^{\bar{m}}\frac{(r+\bar{m})!}{r!\bar{m}!} + \sum_{\bar{m}=1}^{\infty}x^{\bar{m}}\frac{(r+\bar{m})!}{r!(\bar{m}-1)!} \qquad (28)\\ &= (r+1)f(x) + x\frac{df(x)}{dx}, \qquad (29)\\ (1-x)\frac{df}{dx} &= (r+1)f \quad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{1}{(1-x)^{r+1}}. \qquad (30)\end{aligned}$$

Also gilt für Gl. (25),

$$S_r = \frac{x^{r+1/2}}{(1-x)^{r+1}} = \frac{x^{1/2}}{1-x}\left(\frac{x}{1-x}\right)^r = Z\langle\hat{b}^\dagger\hat{b}\rangle^r. \qquad (31)$$

Damit folgt

$$\left\langle \exp(\hat{B}) \right\rangle = Z^{-1} e^{|\lambda|^2/2} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2r}}{r!} S_r \tag{32}$$

$$= e^{|\lambda|^2/2} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2r}}{r!} \langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle^r = e^{|\lambda|^2/2} \exp\left[|\lambda|^2 \langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle \right]$$

$$= \exp\left[|\lambda|^2 \langle \hat{b}^\dagger \hat{b} + 1/2 \rangle \right] = \exp\left(\frac{1}{2} \langle \hat{B}^2 \rangle \right). \tag{33}$$

3. Zweite Quantisierung: Fermi-Statistik. (10 Punkte)

Betrachten Sie ein System von N nichtwechselwirkenden Fermionen im Grundzustand $|\Psi_0\rangle$. Das System befindet sich im 3d-Volumen V. Man kann den Dichte-Operator für Teilchen mit z-Komponente des Spins σ durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken:

$$\hat{n}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k}',\sigma}.$$

Berechnen Sie die Korrelation der Teilchenzahldichte

$$\langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) | \Psi_0 \rangle$$

für $\sigma_1 = \sigma_2$ und $\sigma_1 \neq \sigma_2$.

Lösung

Der Grundzustand ist

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\sigma, |\mathbf{k}_a| \le k_F} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_a,\sigma} |0\rangle \,. \tag{34}$$

Das Produkt der Dichteoperatoren kann mit der Fourierdarstellung geschrieben werden als,

$$\hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4)\mathbf{r}_2} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\sigma_1} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_3,\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_4,\sigma_2} \,. \tag{35}$$

Mit dem Grundzustand aus Gl. (34) ergibt sich für den Fall ungleicher Spins,

$$\left\langle \Psi_0 | \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\sigma_1} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_3,\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_4,\sigma_2} | \Psi_0 \right\rangle \Big|_{\sigma_1 \neq \sigma_2} = \begin{cases} 1, & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2, \quad \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4, \quad |\mathbf{k}_{1,3}| \le k_F \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{36}$$

Für den Fall gleicher Spins erhalten wir dagegen,

$$\left\langle \Psi_0 | \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\sigma_1} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_3,\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_4,\sigma_2} | \Psi_0 \right\rangle \Big|_{\sigma_1 = \sigma_2} = \begin{cases} 1, & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2, \quad \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4, \quad |\mathbf{k}_{1,3}| \le k_F \\ 1, & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4, \quad \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3, \quad |\mathbf{k}_1| \le k_F, |\mathbf{k}_2| > k_F \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{37}$$

Der Mittelwert für $\sigma_1 \neq \sigma_2$ ist demnach

$$\langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_{1,3} \leq k_F} 1 = \left(\frac{N}{V(2s+1)} \right)^2 . \tag{38}$$

Fermionen mit unterschiedlichen Spins verhalten sich als unterscheidbare Teilchen. Der Mittelwert für $\sigma_1 = \sigma_2$ ist ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$)

$$\langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma) | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{V^2} \left[\sum_{\mathbf{k}_{1,3} \leq k_F} 1 + \sum_{\mathbf{k}_1 \leq k_F} \sum_{\mathbf{k}_2 > k_F} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\mathbf{r}} \right] . \tag{39}$$

Wir benutzen

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} > k_F} e^{i\mathbf{kr}} = \frac{1}{V} \left[\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kr}} - \sum_{\mathbf{k} \leq k_F} e^{i\mathbf{kr}} \right] = \delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \leq k_F} e^{i\mathbf{kr}}, \tag{40}$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \leq k_F} e^{i\mathbf{kr}} = \int_{k \leq k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{kr}} = \frac{1}{2\pi^2 r^2} \left[\frac{\sin(k_F r)}{r} - k_F \cos(k_F r) \right] . \tag{41}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} &\langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}_1, \sigma) \hat{n}(\mathbf{r}_2, \sigma) | \Psi_0 \rangle = \left(\frac{N}{V(2s+1)} \right)^2 \\ &+ \left\{ \delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{2\pi^2 r^2} \left[\frac{\sin(k_F r)}{r} - k_F \cos(k_F r) \right] \right\} \left\{ \frac{1}{2\pi^2 r^2} \left[\frac{\sin(k_F r)}{r} - k_F \cos(k_F r) \right] \right\} \\ &= \left(\frac{N}{V(2s+1)} \right)^2 + \delta(\mathbf{r}) \frac{N}{V(2s+1)} - \frac{1}{4\pi^4 r^4} \left[\frac{\sin(k_F r)}{r} - k_F \cos(k_F r) \right]^2 . \end{aligned} \tag{42}$$

4. Bonusaufgabe: Fermionische Kette. (20 Bonuspunkte)

Der Hamilton-Operator einer ein-dimensionalen fermionischen Kette lautet

$$\hat{H}_0 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[t \left(\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n+1} + \hat{a}_{n+1}^\dagger \hat{a}_n \right) - 2U \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \right] .$$

Führen Sie zunächst eine Fourier-Transformation

$$\hat{a}_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikn} \hat{a}_k$$

durch. Damit zeigen Sie dass $\hat{H}_0 = \sum_k \epsilon(k) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$ gilt mit $\epsilon(k) = 2(t \cos k - U)$. Bestimmen Sie nun das Spektrum $\epsilon(k)$ des Hamilton-Operators $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, wobei

$$\hat{V} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta \left(\hat{a}_n \hat{a}_{n+1} + \hat{a}_{n+1}^\dagger \hat{a}_n^\dagger \right) .$$

Lösung: Wir verwenden die Fourier-Transformation

$$\hat{a}_n = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikn} \hat{a}_k \,, \qquad \hat{a}_k = \sum_n e^{-ikn} \hat{a}_n \,, \tag{43}$$

mit folgender Darstellung der δ-Funktion

$$2\pi\delta(k-k') = \sum_n e^{i(k-k')n} \,, \qquad \delta_{nn'} = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ik(n-n')} \,. \tag{44}$$

Einsetzen der Fourier-Transformation in den Hamilton-Operator $\hat{H}_0$ ergibt,

$$\hat{H}_0 = \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi} \sum_n \left\{ t e^{i(k'-k)n} \left(e^{ik'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} + e^{-ik} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right) - 2U e^{i(k'-k)n} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right\} \tag{45}$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi} \left(\sum_n e^{i(k'-k)n} \right) \left\{ t \left(e^{ik'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} + e^{-ik} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right) - 2U \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right\} \tag{46}$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi} \, 2\pi\delta(k-k') \left\{ t \left(e^{ik'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} + e^{-ik} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right) - 2U \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right\} \tag{47}$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} \, \left[t \left(e^{ik} + e^{-ik} \right) - 2U \right] \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \int \frac{dk}{2\pi} \, 2 \left[t\cos(k) - U \right] \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \,. \tag{48}$$

daraus folgt unmittelbar

$$\varepsilon(k) = 2 \left[t\cos(k) - U \right] \,. \tag{49}$$

Ähnlich verfahren wir mit der Störung $\hat{V}$,

$$\hat{V} = \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi} \sum_n \Delta \left\{ e^{i(k+k')n} e^{ik'} \hat{a}_k \hat{a}_{k'} + e^{-i(k+k')n} e^{-ik'} \hat{a}_{k'} \hat{a}_k \right\} \tag{50}$$

$$= \Delta \int \frac{dk}{2\pi} \left\{ e^{ik} \hat{a}_{-k} \hat{a}_k + e^{-ik} \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \right\} \tag{51}$$

$$= i\Delta \int \frac{dk}{2\pi} \sin(k) \left(\hat{a}_{-k} \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \right) \,. \tag{52}$$

In der letzten Zeile wurde verwendet, dass $\hat{a}_{-k}\hat{a}_k$ und $a_{-k}^\dagger a_k^\dagger$ antisymmetrisch in k sind. Demnach verschwindet das Integral mit $\cos(k)$. Wir führen nun folgende Operatoren ein,

$$\hat{f}_k = \begin{pmatrix} \hat{a}_k \\ \hat{a}_{-k}^\dagger \end{pmatrix} \,, \qquad \hat{f}_k^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{a}_k^\dagger & \hat{a}_{-k} \end{pmatrix} \,. \tag{53}$$

Damit erhalten wir für den Hamilton-Operator,

$$\hat{H}_0 + \hat{V} = \frac{1}{2} \int \frac{dk}{2\pi} \hat{f}_k^\dagger \begin{pmatrix} \varepsilon(k) & -i\Delta\sin(k) \\ +i\Delta\sin(k) & -\varepsilon(k) \end{pmatrix} \hat{f}_k \,. \tag{54}$$

Die Energie-Eigenwerte sind demnach gegeben durch die Eigenwerte der Matrix

$$h = \begin{pmatrix} \varepsilon(k) & -i\Delta\sin(k) \\ +i\Delta\sin(k) & -\varepsilon(k) \end{pmatrix} \,. \tag{55}$$

Diese sind

$$\tilde{\varepsilon}(k) = \pm\sqrt{\varepsilon(k)^2 + \Delta^2 \sin^2(k)} \,. \tag{56}$$

Wir haben $\Delta \in \mathbb{R}$ angenommen.