

Moderne Theoretische Physik I SS 2021

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Vanessa Gall, Dr. Roland WillaBlatt 12
Abgabe 16.07.2021**Wichtige Informationen:**

- Sie können sich im CAMPUS System für die Klausur und den Übungsschein anmelden.
- Dies ist das letzte Aufgabenblatt in diesem Semester. Insgesamt waren 76 Punkte zu vergeben. Mit 38 Punkten (inkl. Minitalks) erreichen Sie den Übungsschein.
- Wenn Sie Interesse an einer Bachelorarbeit im Bereich der Festkörperphysik haben, würde sich das TKM (Theorie, Campus Süd) und das assoziierte IQMT (Theorie und Experiment, Campus Nord) über Ihre Kontaktaufnahme freuen.

1. Anwendung Heisenberg Bild 2

Wir wollen uns hier mit einem Teilgebiet der Festkörperphysik befassen, der Spintronics genannt wird. Er beschäftigt sich mit Problemen, die durch (wechselwirkende) Spins beschrieben werden können. Hierzu betrachten wir einen Mehrteilchen-Hamilton-Operator

$$\hat{H} = J \sum_{j=1}^N \hat{\mathbf{s}}_j \cdot \hat{\mathbf{s}}_{j+1} + \gamma \sum_{j=1}^N \hat{\mathbf{s}}_j \cdot \mathbf{B}. \quad (1)$$

Dieser beschreibt N verschiedene, aus der Vorlesung bekannte und durch die Pauli Matrizen darstellbare Spins $\hat{\mathbf{s}}_j$ (mit $|\hat{\mathbf{s}}_j| = 1/2$) auf einem Ring, die an ein externes magnetisches Feld \mathbf{B} koppeln. Da die erste Summe Produkte von benachbarten Spins enthält, kann man den gesamten Hamilton-Operator nicht als Summe von individuellen Spin-Operatoren schreiben die jeweils nur ein $\hat{\mathbf{s}}_i$ enthalten. Dadurch wird dies zu einem *wechselwirkenden* Problem.

Beachten Sie die Kommutatorrelationen für Spin-1/2 und bringen Sie die Heisenberg-sche Bewegungsgleichung in die Form (bestimmen Sie $\hat{\mathbf{M}}_j$)

$$\frac{d\hat{\mathbf{s}}_j}{dt} = \hat{\mathbf{M}}_j \times \hat{\mathbf{s}}_j. \quad (2)$$

Lösungsskizze:

Aus Gründen der Lesbarkeit schreiben wir im Folgenden den Index H für das heisenbergbild nicht explizit. Die Heisenbergsche Bewegungsgleichung lautet

$$i\hbar \frac{d\hat{\mathbf{s}}_i}{dt} = [\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{H}]. \quad (3)$$

Wir verwenden

$$[\hat{s}_i^\alpha, \hat{s}_j^\beta] = i\hbar \delta_{ij} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma \quad (4)$$

und erhalten

$$\begin{aligned} [\hat{s}_i^\alpha, \hat{\mathbf{s}}_j \cdot \hat{\mathbf{s}}_{j+1}] &= [\hat{s}_i^\alpha, \hat{s}_j^\beta \hat{s}_{j+1}^\beta] = \hat{s}_i^\alpha \hat{s}_j^\beta \hat{s}_{j+1}^\beta - \hat{s}_j^\beta \hat{s}_{j+1}^\beta \hat{s}_i^\alpha \\ &= \hat{s}_j^\beta \hat{s}_i^\alpha \hat{s}_{j+1}^\beta - \hat{s}_j^\beta \hat{s}_{j+1}^\beta \hat{s}_i^\alpha + i\hbar \delta_{ij} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma \hat{s}_{j+1}^\beta \\ &= \hat{s}_j^\beta i\hbar \delta_{i,j+1} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma + i\hbar \delta_{ij} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma \hat{s}_{j+1}^\beta. \end{aligned} \quad (5)$$

Somit gilt

$$[\hat{s}_i^\alpha, \hat{H}] = J \sum_j (\hat{s}_j^\beta i\hbar \delta_{i,j+1} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma + i\hbar \delta_{ij} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma \hat{s}_{j+1}^\beta) + \gamma \sum_j i\hbar \delta_{ij} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma B^\beta \quad (6)$$

was sich durch Ausführen der Summe über die j vereinfachen lässt zu

$$[\hat{s}_i^\alpha, \hat{H}] = Ji\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (\hat{s}_{i-1}^\beta + \hat{s}_{i+1}^\beta) \hat{s}_i^\gamma + \gamma i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_i^\gamma B^\beta \quad (7)$$

Somit erhalten wir in Vektorschreibweise

$$\frac{d\hat{\mathbf{s}}_i}{dt} = J(\hat{\mathbf{s}}_{i-1} + \hat{\mathbf{s}}_{i+1}) \times \hat{\mathbf{s}}_i + \gamma \mathbf{B} \times \hat{\mathbf{s}}_i. \quad (8)$$

Das externe Magnetfeld \mathbf{B} und die benachbarten Spins $\hat{\mathbf{s}}_{i-1} + \hat{\mathbf{s}}_{i+1}$ führen also zu einem Drehmoment auf den betrachteten Spin, und es gilt

$$\hat{\mathbf{M}}_j = [J(\hat{\mathbf{s}}_{j-1} + \hat{\mathbf{s}}_{j+1}) + \gamma \mathbf{B}]. \quad (9)$$

2. Störungstheorie: Harmonischer Oszillator

Bestimmen Sie die Eigenenergien E_n des Hamiltonians

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 + \gamma \hat{x}^4 \quad (10)$$

in erster Ordnung Störungstheorie.

Bestimmen Sie die passende dimensionslose Kopplungskonstante und die Energiekorrektur bis zur linearen Ordnung. Bestimmen Sie die Quantenzahl n bei der für gegebenes γ die Störungstheorie zusammenbricht. Interpretieren Sie dieses Ergebnis.

Lösungsskizze:

Die Energie bis zur ersten Ordnung Störungstheorie ist gegeben durch

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) + E_n^{(1)} \quad (11)$$

wobei die erste Korrektur gegeben ist durch

$$E_n^{(1)} = \gamma \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle \quad (12)$$

Wir drücken den Ortsoperator durch Auf- und Absteigeoperatoren aus, i.e.

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (13)$$

und erhalten

$$E_n^{(1)} = \gamma \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4 | n \rangle = \Gamma \hbar\omega \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4 | n \rangle \quad (14)$$

mit der dimensionslosen Kopplungskonstante

$$\Gamma = \frac{\gamma \hbar}{(2m)^2 \omega^3}. \quad (15)$$

Die einzigen Terme des ausmultiplizierten Ausdruckes $(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4$ welche nicht verschwinden sind die, die den Eigenvektor $|n\rangle$ in sich selbst überführen. Alle anderen Terme verschwinden wegen der Orthogonalität mit $\langle n|$. Von den 16 Termen aus $(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4$, erfüllen nur 6 diese Bedingung, nämlich: $\langle n|\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}^2|n\rangle$, $\langle n|\hat{a}^2\hat{a}^{\dagger 2}|n\rangle$, $\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle$, $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle$, $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}^2\hat{a}^\dagger|n\rangle$, und $\langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}|n\rangle$. Zur Berechnung dieser Matrixelemente verwenden wir

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1} \\ \langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}.\end{aligned}\quad (16)$$

Summiert man nun über alle 6 Terme erhält man

$$E_n^{(1)} = 3\Gamma\hbar\omega(2n(n+1) + 1). \quad (17)$$

Und die gesamte Energie ist gegeben durch

$$E_n = \hbar\omega[(n+1/2) + 3\Gamma(2n(n+1) + 1)] \quad (18)$$

Wenn n einen bestimmten Wert überschreitet, sind die ungestörte Eigenenergie und die erste Energiekorrektur gleich groß. Das passiert gerade bei

$$n_c \simeq \frac{1}{6\Gamma}. \quad (19)$$

Für $n > n_c$ bricht unsere Störungstheorie zusammen. Physikalisch entspricht das dem Regime, in dem $\langle x^2 \rangle$ ähnlich groß wird wie der Störterm im Hamiltonian, also

$$\frac{m\omega^2}{2}\langle x^2 \rangle \simeq \gamma\langle x^4 \rangle. \quad (20)$$

Dort ist die Voraussetzung einer kleinen Störung nicht mehr erfüllt und störungstheoretische Ansätze verlieren ihre Gültigkeit.

3. Störungstheorie: Atom im Potential

Es sei ein geladenes Teilchen in einem Coulomb-Potenzial und einem parabolischen Potenzial ausgesetzt. Der Hamilton-Operator ist dann

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (21)$$

mit \hat{H}_0 dem Hamilton-Operator des Coulomb Problems und der Störung $\hat{H}' = \kappa z^2/2$.

- Geben Sie die Eigenenergien des Wasserstoffproblems und deren Entartung wieder.
- Berechnen Sie die Korrektur der Grundzustandsenergie zu linearer Ordnung in κ .
- Werten Sie den Kommutator $[\hat{H}', \hat{L}_z]$ aus und diskutieren Sie die Konsequenzen Ihres Ergebnisses auf Ausdrücke der Form $\langle n, l', m' | [\hat{H}', \hat{L}_z] | n, l, m \rangle$. Hier sind $|n, l, m\rangle$ Eigenzustände des Coulomb Hamilton Operators.
- Bestimmen Sie die Matrix $M = \langle \phi' | \hat{H}' | \phi \rangle$, wobei $|\phi\rangle = |n, l, m\rangle$ und $|\phi'\rangle = |n', l', m'\rangle$ zum entarteten Eigenraum mit Hauptquantenzahl $n = 2$ gehören. Diagonalisieren sie die Matrix und diskutieren Sie ob die Entartung aufgehoben wurde.

Hinweis: Verwenden Sie obige Ergebnisse sowie die Wellenfunktionen des Coulombproblems (Kugelkoordinaten, siehe Vorlesung). Wenn die Rechnungen zu mühselig werden, können Sie die Entartung auch qualitativ richtig diskutieren.

Lösungsskizze:

- Die Eigenzustände des Wasserstoffatoms sind Zustände $|n, l, m\rangle$, mit den Quantenzahlen $n \in \mathbb{N}$, $0 \leq l < n$ und $-l \leq m \leq l$. Alle Zustände mit derselben Hauptquantenzahl n besitzen dieselbe Energie $E_n = -(Z^2 m e^4 / 2 \hbar^2) / n^2$, wobei wir den Coulomb-Hamilton-Operator schreiben als $\hat{H}_0 = -Z e^2 / \hat{r}$. Die Entartung der Energie E_n ist somit $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$.
- Die Korrektur der Grundzustandsenergie ergibt sich aus ¹

$$\langle 1, s, 0 | \hat{H}' | 1, s, 0 \rangle = (\kappa/2) \int d\mathbf{r} \psi_{1,0,0}^*(\mathbf{r}) z^2 \psi_{1,0,0}(\mathbf{r}). \quad (22)$$

Mit $\psi_{1,0,0} = \langle \hat{\mathbf{r}} | 1, 0, 0 \rangle = R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\varphi, \theta) = (1/a^3 \pi)^{1/2} e^{-r/a}$ ($a = \hbar^2 / m e^2$ ist der Bohrsche Radius) und $z = r \cos(\theta)$ findet man (in Kugelkoordinaten)

$$\langle 1, s, 0 | \hat{H}' | 1, s, 0 \rangle = \frac{\kappa a^2}{2 \cdot 24} \int_0^\infty d\rho \rho^4 e^{-\rho}. \quad (23)$$

Dabei helfen uns die Substitutionen $\zeta = \cos(\theta)$ und $\rho = 2r/a$. Das letzte Integral führt man am besten aus indem man den Integranden schreibt als $f^{(4)}(\alpha, \rho)$, mit $f(\alpha, \rho) = e^{-\alpha\rho}$ und $f^{(\nu)}$ der ν -ten Ableitung nach α . Es gilt dann $F(\alpha, \nu) \equiv \int_0^\infty d\rho f^{(\nu)}(\alpha, \rho) = \partial_\alpha^{(\nu)}(1/\alpha)$. Zum Schluss setzt man in dieser Identität $\alpha = 1$. Es gilt dann $F(1, \nu) = (-1)^\nu \nu!$. Für $\nu = 4$ ist also $F(1, 4) = 24$ und damit lautet die Korrektur zum Grundzustand

$$\langle 1, s, 0 | \hat{H}' | 1, s, 0 \rangle = (\kappa/2) a^2. \quad (24)$$

¹Da das Coulomb-Potenzial keine eigene Längenskala besitzt, geht aus einer dimensionellen Betrachtung hervor, dass die Korrektur von der Größenordnung κa^2 sein muss, mit $a = \hbar^2 / m e^2$ dem Bohrschen Radius.

- c) Der Drehimpulsoperator \hat{L}_z enthält lediglich Terme mit \hat{x} und \hat{y} und deren räumlichen Ableitungen. Daraus folgt sofort, dass er mit \hat{z} kommutiert und somit

$$[\hat{H}', \hat{L}_z] = 0. \quad (25)$$

Daraus folgt weiter, dass

$$0 = \langle n, l', m' | [\hat{H}', \hat{L}_z] | n, l, m \rangle = (m - m') \langle n, l', m' | \hat{H}' | n, l, m \rangle, \quad (26)$$

und damit können höchstens Terme mit $m' = m$ ein nicht-verschwindendes Matrixelement $\langle n, l', m' | \hat{H}' | n, l, m \rangle$ besitzen.

- d) Im Sektor $n = 2$ gibt es bei $E_2 = -(Z^2 m e^4 / 2 \hbar^2) / 4$ vier entartete Zustände welche wir mit $\{|2, s, 0\rangle, |2, p, 1\rangle, |2, p, 0\rangle, |2, p, -1\rangle\}$ beschreiben ($l = 0 \rightarrow s, l = 1 \rightarrow p, l = 2 \rightarrow d, \dots$). Es genügt die diagonalen Terme $\langle 2, l, m | \hat{H}' | 2, l, m \rangle$ und die zwei ausserdiagonalen Elemente $\delta = \langle 2, s, 0 | \hat{H}' | 2, p, 0 \rangle, \delta^* = \langle 2, p, 0 | \hat{H}' | 2, s, 0 \rangle$ zu berechnen. Für erstere gilt es, wie in Teilaufgabe b), Integrale der Form

$$\langle 2, l, m | \hat{H}' | 2, l, m \rangle = \frac{\kappa}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr r^2 \sin(\theta) R_{2,l}(r) Y_{l,m}^*(\varphi, \theta) r^2 \cos^2(\theta) R_{2,l}(r) Y_{l,m}(\varphi, \theta) \quad (27)$$

zu berechnen. Wir finden analog

$$\langle 2, s, 0 | \hat{H}' | 2, s, 0 \rangle = 14(\kappa/2)a^2 \quad (28)$$

$$\langle 2, p, 1 | \hat{H}' | 2, p, 1 \rangle = \langle 2, p, -1 | \hat{H}' | 2, p, -1 \rangle = 6(\kappa/2)a^2 \quad (29)$$

$$\langle 2, p, 0 | \hat{H}' | 2, p, 0 \rangle = 18(\kappa/2)a^2 \quad (30)$$

Dass $\langle 2, p, 1 | \hat{H}' | 2, p, 1 \rangle = \langle 2, p, -1 | \hat{H}' | 2, p, -1 \rangle$ gilt, geht aus Symmetriebetrachtungen hervor. Daraus schliessen wir, dass sich die Energien von $|2, p, 1\rangle$ und $|2, p, -1\rangle$ zwar ändern, die beiden Zustände aber weiterhin entartet bleiben. Aus c) wissen wir, dass die beiden Zustände mit keinem anderen Zustand hybridisieren können. Es bleiben also nur noch die Terme δ und δ^* zu bestimmen (welche durch komplexe Konjugation in Verbindung stehen). Wir schreiben

$$\langle 2, s, 0 | \hat{H}' | 2, p, 0 \rangle = \frac{\kappa}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr r^2 \sin(\theta) R_{2,0}(r) Y_{0,0}(\varphi, \theta) r^2 \cos^2(\theta) R_{2,1}(r) Y_{1,0}(\varphi, \theta) \quad (31)$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \cos^3(\theta) \right] \left[\int_0^\infty dr r^2 R_{2,0}(r) r R_{2,1}(r) \right] = 0. \quad (32)$$

Das Verschwinden geht aus der Polarwinkelintegration hervor. Wir haben somit gefunden, dass $\delta = \delta^* = 0$. Die Matrix nimmt dann die diagonale Form

$$\langle 2, l', m' | \hat{H}' | 2, l, m \rangle = (\kappa/2)a^2 \begin{pmatrix} 14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 18 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}, \quad (33)$$

an. Zu dieser Ordnung in der Störungstheorie mischen sich die Zustände $|2, s, 0\rangle$ und $|2, p, 0\rangle$ nicht. Trotzdem wird die Entartung teilweise aufgehoben: Alle Zustände entfernen sich von der Energie E_2 , wobei die Zustände mit endlichem Drehimpuls weiter (zweifach) entartet bleiben. Diese Erkenntnis kann auch durch qualitative Argumente gewonnen werden.