Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie der Kondensierte Materie

Moderne Theoretische Physik III (Einführung in die Theorie der Kondensierten Materie) SS 2024

Prof. Dr. A. D. Mirlin

Dr. Risto Ojajärvi and Dr. Paul Pöpperl

Blatt 4, Abgabe bis 17.06.2024

Besprechung 21.06.2024

1. Vielteilchen-Quantenzustände (10 + 10 + 10 = 30 Punkte)

Betrachten Sie ein System in dem die (normierten) Einteilchenzustände $\phi_\lambda(\mathbf{r})$ bekannt sind, wobei $\mathbf{r}$ die Ortskoordinate notiert.

(a) Das System enthalte drei identische, spinlose Bosonen in den Zuständen λ_1, λ_2, λ_3. Drücken Sie die normierte Dreiteilchen-Wellenfunktion $\psi_{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3)$ durch die Einteilchenzustände aus. Achtung: $\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3$ sind nicht notwendigerweise unterschiedlich. Unterscheiden Sie alle möglichen Fälle.

(b) Nehmen Sie jetzt an, dass es nur eine räumliche Einteilchenwellenfunktion $\phi(\mathbf{r})$ gibt, das System aber mit drei $S = 2$ (S ist Spin) Bosonen besetzt ist. Wie viele unabhängige Einteilchenzustände gibt es? Wie viele unabhängige Dreiteilchenzustände gibt es in dem System? Erklären Sie.

(c) Wie viele Spin-$\frac{1}{2}$ oder Spin-$\frac{3}{2}$ Fermionen kann man mit einer Ortswellenfunktion $\phi(\mathbf{r})$ unterbringen? Schreiben Sie die Slater-Determinante für den zweiten Fall auf. Nennen Sie den Normierungsfaktor explizit.

2. Green'sche Funktion wechselwirkungsfreier Fermionen bei endlicher Temperatur

(5 + 10 + 5 + 10 + 10 + 10 = 40 Punkte +10 Bonuspunkte)

Wir betrachten ein System von nichtwechselwirkenden Fermionen mit Hamilton-Operator (Operatoren sind mit Hut notiert)

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}. \tag{1}$$

$\hat{c}(t), \hat{c}^\dagger(t)$ sind Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren. Wir wollen die Green'sche Funktion

$$G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) := -\mathrm{i} \int \mathrm{d}(t-t')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t')\omega} \left\langle \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t) \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}',t') \right\rangle \tag{2}$$

$$=: \int \mathrm{d}(t-t')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t')\omega} G(\mathbf{r},\sigma,t;\mathbf{r}',\sigma',t') \tag{3}$$

bestimmen. Hierbei notieren die eckigen Klammern den thermischen Erwartungswert im großkanonischen Ensemble. $\hat{\psi}(t)$ und $\hat{\psi}^\dagger(t)$ sind die Feldoperatoren (wie in der Vorlesung eingeführt) im Heisenbergbild. Die Definition der zeitunabhängigen Feldoperatoren ist wie in der Vorlesung

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) := \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}. \tag{4}$$

(a) Drücken Sie $G(\mathbf{r},\sigma,t;\mathbf{r}',\sigma',t')$ durch

$$\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t') := -\mathrm{i}\left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}(t)\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma'}(t')\right\rangle \tag{5}$$

aus.

(b) Lösen Sie die Bewegungsgleichung für die Operatoren $\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}$, $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$—finden Sie also die Funktionen $f_{\mathbf{k}',\sigma';\mathbf{k},\sigma}(t)$ so dass

$$\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} f_{\mathbf{k}',\sigma';\mathbf{k},\sigma}(t)\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma'} \tag{6}$$

und entsprechend für den Vernichtungsoperator.

(c) Bringen Sie $\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t')$ auf die Form

$$\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t') = g_{\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k}',\sigma'}(t,t')\cdot h_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \tag{7}$$

und bestimmen Sie g und h.

(d) Erklären Sie, warum $\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t') = \tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t-t')\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}$ und bestimmen Sie $\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t-t')$.

(e) Finden Sie $G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$ in drei räumlichen Dimensionen mit $\xi_{\sigma,\mathbf{k}} = \dfrac{\mathbf{k}^2}{2m}$.

(f) Bestimmen Sie die Bewegungsgleichung der retardierten Green'schen Funktion

$$G^{\mathrm{R}}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') := -\mathrm{i}\theta(t-t')\left\langle\left\{\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t),\hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}',t')\right\}\right\rangle \tag{8}$$

indem Sie die zeitliche Ableitung $\mathrm{i}\partial_t G$ bestimmen (wieder mit $\xi = \mathbf{k}^2/(2m)$).

3. Bosonische Bogoliubov-Transformation (5 + 10 = 15 Punkte)

(a) $|\Psi_0\rangle$ sei der Bogoliubov Grundzustand eines Bose-Einstein-Kondensates. Betrachten Sie einen Zustand mit n Anregungen im Zustand $\mathbf{q}$

$$|\phi\rangle = \frac{(b^{\dagger}_{\mathbf{q}})^n}{\sqrt{n}}\,|\Psi_0\rangle\,, \tag{9}$$

wobei die Operatoren $b^{\dagger}_{\mathbf{q}}$ in Gleichung (2.101) des Skriptes definiert sind,

$$b_{\mathbf{p}} := u_p a_{\mathbf{p}} + v_p a^{\dagger}_{-\mathbf{p}} \tag{10}$$

(a und $a^{\dagger}$ sind die freien bosonischen Vernichter und Erzeuger).

Rechnen Sie die erwartete Anzahl von freien Teilchen jeweils in den Zuständen $\mathbf{q}$ und $-\mathbf{q}$ aus.

(b) In der Vorlesung wurde der Hamilton-Operator des wechselwirkenden Bose-Gases diagonalisert, aber die Grundzustandswellenfunktion wurde nicht explizit beschrieben. Es kann gezeigt werden dass diese die Form

$$|\Psi_0\rangle = C\exp\left(\sqrt{N_0}a^{\dagger}_0 + \sum_{\mathbf{p}\neq 0}{}^{'} f_{\mathbf{p}}a^{\dagger}_{\mathbf{p}}a^{\dagger}_{-\mathbf{p}}\right)|0\rangle \tag{11}$$

hat, wobei C eine Normierungskonstante ist, N_0 die Teilchenzahl im Kondensat, und $|0\rangle$ das freie Vakuum: $a_{\mathbf{q}}|0\rangle = 0$. Die gestrichene Summe notiert wie in der Vorlesung, dass wir jedes $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$-Paar nur einfach zählen.

Bestimmen Sie die Parameter $f_{\mathbf{p}}$ indem Sie fordern, dass $|\Psi_0\rangle$ das Vakuum des wechselwirkenden Systems ist:

$$b_{\mathbf{p}}\,|\Psi_0\rangle = 0, \quad \text{for} \quad \mathbf{p} \neq 0 \tag{12}$$

Hinweis: Sie können z.B. die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$\mathrm{e}^{B} A \mathrm{e}^{-B} = A + [B, A] + \frac{1}{2!}[B, [B, A]] + \frac{1}{3!}[B, [B, [B, A]]] + \cdots \tag{13}$$

verwenden. Alternativ könne Sie auch die Exponentialfunktion als Reihe aussschreiben und $b_{\mathbf{p}}$ durchkommutieren.

4. Gross-Pitaevskii-Gleichung für ein harmonisches Potential
$(5 + 10 + 5 = 15$ Punkte $+5$ Bonus-Punkte$)$

Die Kondensat-Wellenfunktion eines wechselwirkenden Bose-Gases wird durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung beschrieben. Die zeitunabhängige Version lautet

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \mu + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + U|\Psi(\mathbf{r})|^2\right] \Psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{14}$$

Wir betrachten ein Bose-Gas in einem harmonischen Potential, $U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \dfrac{1}{2} m\omega^2 r^2$.

(a) Berechnen Sie dass Dichteprofil $\rho(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2$ im Thomas-Fermi-Limes, in dem die Wechselwirkungsenergie $U|\Psi(\mathbf{r})|^2$ so groß ist, dass die kinetische Energie vernachlässigt werden kann. Finden Sie den Radius ausserhalb dessen die Wellenfunktion verschwindet als Funktion des chemischen Potentials.

(b) Finden Sie die Energie pro Teilchen, indem Sie die Normierungsbedingung

$$N_0 = \int d^3\mathbf{r}|\Psi(\mathbf{r})|^2,$$

nutzen und die thermodynamische Relation $\mu = \dfrac{\partial E}{\partial N}$ integrieren.

(c) Bestimmen Sie die Energiedichte des kinetischen Terms der Thomas-Fermi-Lösung. Was stellen Sie fest?