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.

Lösung: In jedem Fall muss die Gesamtwellenfunktion symmetrisch unter Vertauschung zweier Teilchen sein.

Wir unterscheiden drei verschiedener Fälle an der Anzahl verschiedener Zustände:

1. Alle drei Zustände sind unterschiedlich $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3 \neq \lambda_1$. Dann

$$\psi_{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_3) + \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_3)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_1) \quad (1)$$
$$+ \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_3)\phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_2) + \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_3) \quad (2)$$
$$+ \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_3)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_2) + \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_3)\phi_{\lambda_2}(\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_1)] \quad (3)$$

2. Zwei der Zustände sind gleich, $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$:

$$\psi_{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_3) + \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_3)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_1) \quad (4)$$
$$+ \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_3)\phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda_3}(\mathbf{r}_2)] \quad (5)$$
$$(6)$$

3. Alle Zustände sind gleich $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$:

$$\psi_{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda_1}(\mathbf{r}_3) \quad (7)$$

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

Lösung: Die Spin-Werte $\sigma \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ sind möglich, es gibt also fünf unabhängige Einteilchenzustände. Wir zählen jetzt die Möglichkeiten, die Bosonen auf diese Zustände zu verteilen. Dabei gibt es die gleiche Systematik wie in der vorangegangenen Aufgabe:

1. Alle Teilchen in unterschiedlichen Zuständen. Das entspricht der Anzahl Möglichkeiten, drei der fünf Zustände auszuwählen: $\binom{5}{3} = 10$
2. Zwei der Teilchen im gleichen Zustand: Auswahl zweier Zustände, mit zusätzlichem Faktor zwei zur Auswahl des doppelt besetzten Zustandes. $\binom{5}{2} \cdot 2 = 20$ Möglichkeiten.
3. Alle Teilchen im gleichen Zustand: 5 Möglichkeiten.

Insgesamt erhalten wir 35 verschiedene Zustände.

(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.

Lösung: Es ist nur ein Fermion pro Einteilchenzustand erlaubt. Das ergibt zwei Fermionen für Spin-$\frac{1}{2}$ und vier für Spin-$\frac{3}{2}$, wobei $\sigma \in \left\{-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}$. Die entsprechende Slater-Determinante lautet

$$\psi_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3)\phi(\mathbf{r}_4)}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} \chi_{-3/2}(\sigma_1) & \chi_{-3/2}(\sigma_2) & \chi_{-3/2}(\sigma_3) & \chi_{-3/2}(\sigma_4) \\ \chi_{-1/2}(\sigma_1) & \chi_{-1/2}(\sigma_2) & \chi_{-1/2}(\sigma_3) & \chi_{-1/2}(\sigma_4) \\ \chi_{1/2}(\sigma_1) & \chi_{1/2}(\sigma_2) & \chi_{1/2}(\sigma_3) & \chi_{1/2}(\sigma_4) \\ \chi_{3/2}(\sigma_1) & \chi_{3/2}(\sigma_2) & \chi_{3/2}(\sigma_3) & \chi_{3/2}(\sigma_4) \end{vmatrix}. \tag{8}$$

Wobei $\frac{1}{\sqrt{4!}}$ der Normierungsfaktor ist.

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)

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}. \tag{9}$$

Wir wollen die Green'sche Funktion

$$G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) := -\mathrm{i} \int \mathrm{d}(t-t')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t')\omega} \left\langle \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}', t') \right\rangle \tag{10}$$

$$=: \int \mathrm{d}(t-t')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t')\omega} G(\mathbf{r}, \sigma, t; \mathbf{r}', \sigma', t') \tag{11}$$

bestimmen. Hierbei notieren die eckigen Klammern den thermischen Erwartungswert im großkanonischen Ensemble und $\hat{c}(t), \hat{c}^\dagger(t)$ sind Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren im Heisenbergbild. $\hat{\psi}$ und $\hat{\psi}^\dagger$ sind die Feldoperatoren (wie in der Vorlesung eingeführt)

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) := \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}. \tag{12}$$

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

$$\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t') := -\mathrm{i}\left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}(t)\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'}(t')\right\rangle \tag{13}$$

aus.

Lösung: Wir setzen die Definitionen der Feldoperatoren ein:

$$G(\mathbf{r},\sigma,t;\mathbf{r}',\sigma',t') = -\frac{\mathrm{i}}{V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}'\mathbf{r}'}\left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}(t)\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'}(t')\right\rangle \tag{14}$$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}'\mathbf{r}'}\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t'). \tag{15}$$

(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

$$\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} f_{\mathbf{k}',\sigma';\mathbf{k},\sigma}(t)\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'} \tag{16}$$

und entsprechend für den Vernichtungsoperator.

Lösung: Die Heisenberg-Bewegungsgleichung für den Erzeugungsoperator lautet

$$\partial_t\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \mathrm{i}[\hat{H},\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}(t)] \tag{17}$$

$$= \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}[\hat{H},\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \tag{18}$$

$$= \mathrm{i}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'}\xi_{\mathbf{k}',\sigma'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}[\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'},\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \tag{19}$$

$$= \mathrm{i}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'}\xi_{\mathbf{k}',\sigma'}c^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'}(t)\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}\delta_{\sigma',\sigma} \tag{20}$$

$$= \mathrm{i}\xi_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}(t), \tag{21}$$

wobei wir verwendet haben, dass $\hat{H}$ mit dem Zeitentwicklungsoperator kommutiert und

$$[\hat{c}^\dagger_\alpha\hat{c}_\alpha,\hat{c}^\dagger_\beta] = \hat{c}^\dagger_\alpha\hat{c}_\alpha\hat{c}^\dagger_\beta - \hat{c}^\dagger_\beta\hat{c}^\dagger_\alpha\hat{c}_\alpha = \hat{c}^\dagger_\alpha\hat{c}_\alpha\hat{c}^\dagger_\beta + \hat{c}^\dagger_\alpha\hat{c}^\dagger_\beta\hat{c}_\alpha \tag{22}$$

$$= \hat{c}^\dagger_\alpha\{\hat{c}^\dagger_\beta,\hat{c}_\alpha\} = \hat{c}^\dagger_\alpha\delta_{\alpha,\beta}. \tag{23}$$

Diese Differentialgleichung wird offenbar von

$$\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi_{\mathbf{k},\sigma}t}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} \tag{24}$$

gelöst. Daher auch

$$f_{\mathbf{k}',\sigma';\mathbf{k},\sigma}(t) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi_{\mathbf{k},\sigma}t}. \tag{25}$$

Durch hermitesche Konjugation erhalten wir

$$\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi_{\mathbf{k},\sigma}t}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}. \tag{26}$$

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

$$\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t') = g_{\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k}',\sigma'}(t,t') \cdot h_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \tag{27}$$

und bestimmen Sie g und h.

Lösung: Mit der Lösung aus der vorangegangenen Teilaufgabe erhalten wir

$$\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t;\mathbf{k}',\sigma',t') = \underbrace{-\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi_{\mathbf{k},\sigma}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi_{\mathbf{k}',\sigma'}t'}}_{=:g_{\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k}',\sigma'}(t,t')} \underbrace{\left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'} \right\rangle}_{=:h_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')}. \tag{28}$$

(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 $\tilde{G}(\mathbf{k},\sigma,t-t')$.

Lösung: Wir betrachten h und schreiben den thermischen Erwartungswert aus:

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'} \right\rangle &= \frac{1}{Z_{\mathrm{G}}} \sum_{\{n_{\mathbf{k}'',\sigma''}\}} \langle \{n_{\mathbf{k}'',\sigma''}\}|\, \mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}',\sigma'}\,|\{n_{\mathbf{k}'',\sigma''}\}\rangle && (29)\\
&= \frac{1}{Z_{\mathrm{G}}}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} \sum_{\{n_{\mathbf{k}'',\sigma''}\}} \langle \{n_{\mathbf{k}'',\sigma''}\}|\, \mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}(1-\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma})\,|\{n_{\mathbf{k}'',\sigma''}\}\rangle && (30)\\
&= [1-n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{k},\sigma})]\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} && (31)
\end{aligned}$$

Hier haben wir genutzt, dass $\hat{H}$ und $\hat{N}$ diagonal in der Besetzungszahlbasis sind, und dass erzeugter und vernichteter Zustand jeweils gleich sein müssen dass der entsprechende Beitrag nicht verschwindet. In der letzten Zeile haben wir die großkanonische Zustandssumme und die Fermifunktion

$$n_{\mathrm{F}}(x) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(x-\mu)}+1} \tag{32}$$

identifiziert. Wir finden also

$$G(\mathbf{k},\sigma,t-t') = -\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi_{\mathbf{k},\sigma}(t-t')}[1-n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{k},\sigma})]. \tag{33}$$

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

Lösung: Wir führen zunächst Fouriertransformation $(t-t') \to \omega$ aus und erhalten

$$\begin{aligned}
G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k},\omega) &= -\mathrm{i}\delta_{\sigma,\sigma'}[1-n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{k},\sigma})]\int \mathrm{d}\Delta t\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta t(\xi_{\mathbf{k},\sigma}-\omega)} \qquad \Delta t := (t-t') && (34)\\
&= -(2\pi)\mathrm{i}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\xi_{\mathbf{k},\sigma}-\omega)[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)] && (35)
\end{aligned}$$

Damit:

$$\frac{1}{2\pi}G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = -\frac{\mathrm{i}}{V}\delta_{\sigma,\sigma'}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\delta(\xi_{\mathbf{k},\sigma}-\omega)[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)] \tag{36}$$

$$\to -\mathrm{i}[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)]\delta_{\sigma,\sigma'}\int \frac{\mathrm{d}^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\delta(\xi_{\mathbf{k},\sigma}-\omega) \quad r := |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \tag{37}$$

$$= -\mathrm{i}[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)]\delta_{\sigma,\sigma'}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\cos(\theta)\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}k\cdot k^2}{(2\pi)^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos(\theta)}\delta(k^2/(2m)-\omega) \tag{38}$$

$$= -\frac{2\mathrm{i}[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)]}{r}\delta_{\sigma,\sigma'}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}kk}{(2\pi)^2}\sin(kr)\delta(k^2/(2m)-\omega) \tag{39}$$

$$= -\frac{2\mathrm{i}m[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)]}{r}\delta_{\sigma,\sigma'}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\omega'}{(2\pi)^2}\sin\left(\sqrt{2m\omega'}r\right)\delta(\omega'-\omega) \tag{40}$$

$$= -\frac{2\mathrm{i}m[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)]}{(2\pi)^2 r}\delta_{\sigma,\sigma'}\sin\left(\sqrt{2m\omega}r\right) \tag{41}$$

$$= -\mathrm{i}\delta_{\sigma,\sigma'}\nu(\omega)[1-n_{\mathrm{F}}(\omega)]\frac{\sin(k_\omega r)}{k_\omega r}, \tag{42}$$

$$\omega =: \frac{k_\omega^2}{2m}, \quad \nu(\omega) := \frac{\sqrt{m^3\omega}}{\pi^2\sqrt{2}} \tag{43}$$

Hier haben wir die Zustandsdichte in drei Dimensionen für quadratische Dispersionsrelation $\nu(\omega)$ identifiziert.

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

$$G^{\mathrm{R}}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') := -\mathrm{i}\theta(t-t')\left\langle\left\{\hat\psi_\sigma(\mathbf{r},t),\hat\psi^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}',t')\right\}\right\rangle \tag{44}$$

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

Lösung:

$$\mathrm{i}\partial_t G^{\mathrm{R}}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = \delta(t-t')\delta_{\sigma',\sigma'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \theta(t-t')\left\langle\left\{\partial_t\hat\psi_\sigma(\mathbf{r},t),\hat\psi^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}',t')\right\}\right\rangle \tag{45}$$

Hier haben wir im ersten Term die Anti-Kommutatorrelation der Feldoperatoren bei gleicher Zeit genutzt (die Ableitung der Theta-Funktion ergibt die zeitliche Delta-Funktion).

Die Zeitableitung des Feldoperators:

$$\partial_t\hat\psi_\sigma(\mathbf{r},t) = \mathrm{i}[\hat H,\hat\psi_\sigma(\mathbf{r})](t) \tag{46}$$

$$= -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}}c_{\mathbf{k},\sigma}(t) \tag{47}$$

$$= \frac{\mathrm{i}}{2m}\nabla^2\hat\psi_\sigma(\mathbf{r},t) \tag{48}$$

wobei wir für die Berechnung des Kommutators von Zeile (46) auf (47) das Ergebnis aus Teilaufgabe b) genutzt haben:

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})] &= ([\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r}), \hat{H}])^\dagger && (49)\\
&= -([\hat{H}, \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r})])^\dagger && (50)\\
&= -\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}} \left([\hat{H}, c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}]\right)^\dagger && (51)\\
&= -\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} && (52)
\end{aligned}$$

Und von Zeile (47) auf (48):

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} (\mathrm{i}\mathbf{k})^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},\sigma}(t) && (53)\\
&= -\frac{2m}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k},\sigma} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},\sigma}(t) && (54)
\end{aligned}$$

Insgesamt finden wir

$$\left[\mathrm{i}\partial_t + \frac{\nabla^2}{2m}\right] G^{\mathrm{R}}_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta_{\sigma,\sigma}\delta(t - t')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{55}$$

Die retardierte Green'sche Funktion aus dieser Aufgabe ist also die Green'sche Funktion der freien Schrödingergleichung.

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 $\mathbf{q}$

$$|\phi\rangle = \frac{(b^\dagger_{\mathbf{q}})^n}{\sqrt{n}} |\Psi_0\rangle, \tag{56}$$

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

$$b_{\mathbf{p}} := u_p a_{\mathbf{p}} + v_p a^\dagger_{-\mathbf{p}} \tag{57}$$

(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.
Lösung:

$$\begin{aligned}
\langle\phi| n_{\mathbf{q}} |\phi\rangle = \langle\phi| a^\dagger_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} |\phi\rangle &= \langle\phi| (u_q b^\dagger_{\mathbf{q}} - v_q b_{-\mathbf{q}})(u_q b_{\mathbf{q}} - v_q b^\dagger_{-\mathbf{q}}) |\phi\rangle && (58)\\
&= \langle\phi| u_q^2 b^\dagger_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + v_q^2 b_{-\mathbf{q}} b^\dagger_{-\mathbf{q}} |\phi\rangle && (59)\\
&= n u_q^2 + v_q^2 \langle\phi| b^\dagger_{-\mathbf{q}} b_{-\mathbf{q}} + 1 |\phi\rangle && (60)\\
&= n u_q^2 + v_q^2. && (61)
\end{aligned}$$

In der zweiten Zeile verschwindet der Mischterm da Projektionen wie $\langle n|n-2\rangle = 0$ entstehen, wobei die Zahl in der Wellenfunktion die Anzahl an Bogoliubov-Anregungen beschreibt. Hierbei haben wir genutzt, dass die Bogoliubov-Operatoren die üblichen bosonischen Kommutatorrelationen erfüllen und $|\Psi_0\rangle$ vernichten. Daher können wir hier mit ihnen wie üblich mit Erzeugern und Vernichtern umgehen. Ähnlich für $-\mathbf{q}$:

$$\langle\phi|\, n_{-\mathbf{q}}\, |\phi\rangle = \langle\phi|\, a^\dagger_{-\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}}\, |\phi\rangle = \langle\phi|\, (u_q b^\dagger_{-\mathbf{q}} - v_q b_{\mathbf{q}})(u_q b_{-\mathbf{q}} - v_q b^\dagger_{\mathbf{q}})\, |\phi\rangle \tag{62}$$
$$= v_q^2 \langle\phi|\, b_{\mathbf{q}} b^\dagger_{\mathbf{q}}\, |\phi\rangle \tag{63}$$
$$= v_q^2(1+n) \tag{64}$$

(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

$$|\Psi_0\rangle = C \exp\left(\sqrt{N_0} a_0^\dagger + \sum_{\mathbf{p}\neq 0}{}' f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}\right) |0\rangle \tag{65}$$

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:

$$b_{\mathbf{p}}\, |\Psi_0\rangle = 0, \quad \text{for} \quad \mathbf{p} \neq 0 \tag{66}$$

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

$$\mathrm{e}^B A \mathrm{e}^{-B} = A + [B,A] + \frac{1}{2!}[B,[B,A]] + \frac{1}{3!}[B,[B,[B,A]]] + \cdots \tag{67}$$

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

Lösung: Aus dem Skript wissen wir

$$b_{\mathbf{p}} = u_p a_{\mathbf{p}} + v_p a^\dagger_{-\mathbf{p}}. \tag{68}$$

Da alle Terme im Exponenten von Gleichung (66) miteinander kommutieren faktorisiert die Exponentialfunktion. Der einzige Term mit dem $b_{\mathbf{p}}$ nicht kommutiert ist $\mathrm{e}^{f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}}$ (da wir jedes Paar $a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}$ nur einfach zählen, ansonsten gäbe es zwei Terme). Wir nutzen also die BCH-Formel mit $A = b_{\mathbf{p}}$ und $B = -f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}$:

$$\mathrm{e}^{-f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}} b_{\mathbf{p}} \mathrm{e}^{f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}} = b_{\mathbf{p}} - [f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}}] + \ldots \tag{69}$$
$$= b_{\mathbf{p}} - u_p f_{\mathbf{p}} [a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}}] + \ldots \tag{70}$$
$$= b_{\mathbf{p}} - u_p f_{\mathbf{p}} [a^\dagger_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}}] a^\dagger_{-\mathbf{p}} + \ldots \tag{71}$$
$$= b_{\mathbf{p}} + u_p f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}} \tag{72}$$

Da $[B,A] \propto a^\dagger_{-\mathbf{p}}$ verschwinden alle weiteren Kommutatoren (mit $(\ldots)$ abgekürzt). Indem wir von links mit $\mathrm{e}^{f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}}$ multiplizieren erhalten wir

$$b_{\mathbf{p}} \mathrm{e}^{f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}} = \mathrm{e}^{f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}} (b_{\mathbf{p}} + u_p f_{\mathbf{p}} a^\dagger_{-\mathbf{p}}) \tag{73}$$

und daher

$$b_{\mathbf{p}} |\Psi_0\rangle = C \exp\left(\sqrt{N_0} a_0^\dagger + \sum_{\mathbf{p}\neq 0}' f_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{-\mathbf{p}}^\dagger \right) (u_p a_{\mathbf{p}} + v_p a_{-\mathbf{p}}^\dagger + u_p f_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}}^\dagger) |0\rangle \tag{74}$$

$$= C \exp\left(\sqrt{N_0} a_0^\dagger + \sum_{\mathbf{p}\neq 0}' f_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{-\mathbf{p}}^\dagger \right) (v_p + u_p f_{\mathbf{p}}) a_{-\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle \tag{75}$$

Dass das 0 ergibt muss gelten

$$f_{\mathbf{p}} = \frac{-v_p}{u_p}. \tag{76}$$

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

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + U|\Psi(\mathbf{r})|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{77}$$

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

(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.

Lösung: Indem wir den kinetischen Term vernachlässigen erhalten wir

$$\left[U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu + U\rho(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{78}$$

wobei $\rho(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2 > 0$ die Teilchendichte ist. Es gibt zwei Lösungszweige. Entweder

$$\Psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{79}$$

oder

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{\mu - U_{\text{ext}}(\mathbf{r})}{U}. \tag{80}$$

Die zweite Lösung ist nicht erlaubt wenn $\mu < U_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, da die Dichte sonst negativ wäre. Der Radius R ausserhalb dessen das Kondensat verschwindet ist also

$$R = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega^2}}. \tag{81}$$

(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 $\mu = \frac{\partial E}{\partial N}$ integrieren.

Lösung:

$$N = \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\,\rho(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{U}\int_0^R \mathrm{d}r\, r^2 \left(\mu - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right) \tag{82}$$

$$= 4\pi\left(\frac{R^3\mu}{3U} - \frac{m\omega^2 R^5}{10U}\right) = \frac{1}{U}\frac{16\pi\sqrt{2}}{15 m^{3/2}\omega^3}\,\mu^{5/2}, \tag{83}$$

Auflösen nach μ ergibt $\mu = CN^{2/5}$, wobei C eine Konstante ist.
Die Gesamtenergie ist

$$E = \int_0^N \mathrm{d}N\,\frac{\partial E}{\partial N} = \frac{5}{7}CN^{7/5} = \frac{5}{7}N\mu. \tag{84}$$

Daher finden wir für die Energie pro Teilchen

$$\frac{E}{N} = \frac{5}{7}\mu. \tag{85}$$

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

Lösung: Die kinetische Energie ist

$$K = \langle\Psi|\, H_{\mathrm{kin}}\,|\Psi\rangle \tag{86}$$

$$= \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\,\Psi^*(\mathbf{r})\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right)\Psi(\mathbf{r}) \tag{87}$$

Dementsprechend ist die kinetische Energiedichte

$$K(\mathbf{r}) := \Psi^*(\mathbf{r})\left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right)\Psi(\mathbf{r}). \tag{88}$$

$$K(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2m}\Psi^*(\mathbf{r})\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = \frac{(m\omega^2)^{3/2}\left(3R^2 - 2r^2\right)}{2\sqrt{2}U\sqrt{R^2 - r^2}}. \tag{89}$$

Hierbei haben wir angenommen dass die Wellenfunktion reell ist, bzw ihre Phase unabhängig von der Koordinate $\mathbf{r}$. Das ist zunächst eine Annahme, da die Phase in dieser Näherung, die die kinetische Energie vernachlässigt, nicht spezifiziert ist. Jedoch erhöhen endliche Phasengradienten die kinetische Energie. Daher sollte der Phasengradient im Grundzustand tatsächlich verschwinden.

Die kinetische Energiedichte divergiert am Rand der Potentialfalle. Ausserdem verschwinden die Energiedichten, die zu Wechselwirkung und Einteilchenpotential gehören. Daher muss unsere Näherung an dieser Stelle fehlschlagen.