

**Aufgabe 3: Das Mehrelektronenproblem im Festkörper**

Für die Behandlung des Mehrelektronenproblems im Festkörper im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenfeldtheorie können Sie das folgende Modell zugrunde legen. Die Valenzelektronen bewegen sich in einem effektiven 1-Teilchen-Potential  $V(\mathbf{x})$ , das von den Elektronen der inneren atomaren Schalen zusammen mit den als ruhend angenommenen Atomkernen erzeugt wird. Ferner haben Sie zu berücksichtigen, daß die Coulombsche Wechselwirkung zwischen den Valenzelektronen durch die inneren Elektronen und die Atomkerne abgeschirmt wird, so daß ein effektives symmetrisches Wechselwirkungspotential  $U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = U(\mathbf{x}', \mathbf{x})$  entsteht. In der nichtrelativistischen Quantenfeldtheorie setzt sich der Hamiltonoperator der Valenzelektronen  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  aus dem 1-Teilchen-Hamiltonoperator

$$\hat{H}_1 = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

und dem 2-Teilchen-Hamiltonoperator

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t) U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}', t) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

zusammen. Da die Elektronen Fermionen sind, müssen Sie für die Feldoperatoren  $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$  und  $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t)$  im Heisenberg-Bild die folgenden gleichzeitigen Antikommutatorrelationen fordern:

$$\left[ \hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}(\mathbf{x}', t) \right]_+ = \left[ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t) \right]_+ = 0, \quad \left[ \hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t) \right]_+ = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (3)$$

a) Die Feldoperatoren  $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$  und  $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t)$  lassen sich immer in eine willkürlich wählbare Basis von 1-Teilchen-Wellenfunktionen  $\phi_k(\mathbf{x})$  entwickeln:

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) = \sum_k \hat{a}_k(t) \phi_k(\mathbf{x}), \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) = \sum_k \hat{a}_k^\dagger(t) \phi_k^*(\mathbf{x}). \quad (4)$$

Hierbei steht die Abkürzung  $k$  stellvertretend für alle Quantenzahlen, die den Zustand eines einzelnen Valenzelektrons charakterisieren. Die Orthonormalitätsrelation der 1-Teilchen-Wellenfunktionen  $\phi_k(\mathbf{x})$  lautet dann:

$$\int d^3x \phi_k^*(\mathbf{x}) \phi_{k'}(\mathbf{x}) = \delta_{k, k'}. \quad (5)$$

Berechnen Sie die gleichzeitigen Antikommutatorrelationen, die sich hieraus für die Operatoren  $\hat{a}_k(t)$  und  $\hat{a}_k^\dagger(t)$  ergeben:

$$\left[ \hat{a}_k(t), \hat{a}_{k'}(t) \right]_+ = ?, \quad \left[ \hat{a}_k^\dagger(t), \hat{a}_{k'}^\dagger(t) \right]_+ = ?, \quad \left[ \hat{a}_k(t), \hat{a}_{k'}^\dagger(t) \right]_+ = ?. \quad (6)$$

(2 Punkte)

b) Drücken Sie sowohl den 1-Teilchen-Hamiltonoperator  $\hat{H}_1$  als auch den 2-Teilchen-Hamiltonoperator  $\hat{H}_2$  durch die Operatoren  $\hat{a}_k(t)$  und  $\hat{a}_k^\dagger(t)$  aus. Sie erhalten dabei das Ergebnis:

$$\hat{H}_1 = \sum_k \sum_{k'} H_{k, k'} \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_{k'}(t), \quad (7)$$

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_k \sum_{k'} \sum_{l'} \sum_l U_{k, k', l', l} \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_{k'}^\dagger(t) \hat{a}_{l'}(t) \hat{a}_l(t). \quad (8)$$

Bestimmen Sie die explizite Form der Matrixelemente  $H_{k, k'}$  und  $U_{k, k', l', l}$ .

(1 Punkt)

#### Aufgabe 4: Die Besetzungszahldarstellung

Der Hamiltonoperator nichtwechselwirkender Fermionen lautet in der Fourierdarstellung

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_k(t), \quad (9)$$

wobei die Operatoren  $\hat{a}_k(t)$  und  $\hat{a}_k^\dagger(t)$  gleichzeitigen Antikommutatorrelationen (6) genügen.

a) Berechnen Sie die Heisenberggleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_k(t) = [\hat{a}_k(t), \hat{H}]_-, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_k^\dagger(t) = [\hat{a}_k^\dagger(t), \hat{H}]_-, \quad (10)$$

und geben Sie deren Lösungen für die Anfangsbedingungen  $\hat{a}_k(0) = \hat{a}_k$  und  $\hat{a}_k^\dagger(0) = \hat{a}_k^\dagger$  an. Führen Sie den Teilchenzahloperator  $\hat{n}_k(t) = \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_k(t)$  ein und zeigen Sie, daß zwei Teilchenzahloperatoren  $\hat{n}_k(t)$  und  $\hat{n}_{k'}(t)$  miteinander vertauschen:

$$[\hat{n}_k(t), \hat{n}_{k'}(t)]_- = 0. \quad (11)$$

Vertauscht der Teilchenzahloperator  $\hat{n}_k(t)$  auch mit dem Hamiltonoperator  $\hat{H}$ ? Zeigen Sie, daß der Teilchenzahloperator  $\hat{n}_k(t)$  nicht explizit von der Zeit abhängt. Dies bedeutet, daß Sie im folgenden  $\hat{n}_k = \hat{n}_k(t)$  setzen können.

(3 Punkte)

b) Aufgrund der Identität (11) gibt es einen gemeinsamen Satz von Eigenzuständen für alle Teilchenzahloperatoren  $\hat{n}_k$ . Diese Eigenzustände lassen sich durch die Eigenwerte  $n_k$  der Teilchenzahloperatoren  $\hat{n}_k$  charakterisieren:

$$\hat{n}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = n_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle. \quad (12)$$

Zeigen Sie, daß die Zustände  $|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$  auch Eigenzustände des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  sind und geben Sie deren Energieeigenwerte in Abhängigkeit der Eigenwerte  $n_k$  an. Beweisen Sie außerdem die Identität

$$\hat{n}_k^2 = \hat{n}_k. \quad (13)$$

Welche Auswirkung hat dies auf die Eigenwerte  $n_k$  der Teilchenzahloperatoren  $\hat{n}_k$ ? Welches physikalische Prinzip entspricht diesem Ergebnis?

(3 Punkte)

c) Berechnen Sie die Kommutatoren der Teilchenzahloperatoren  $\hat{n}_k$  mit den Operatoren  $\hat{a}_k = \hat{a}_k(0)$  und  $\hat{a}_k^\dagger = \hat{a}_k^\dagger(0)$ :

$$[\hat{n}_k, \hat{a}_k]_- = ?, \quad [\hat{n}_k, \hat{a}_k^\dagger]_- = ?. \quad (14)$$

Zeigen Sie mit Hilfe von (14), daß die fermionischen Operatoren  $\hat{a}_k$  und  $\hat{a}_k^\dagger$  analog zum bosonischen Fall als Vernichtungs- und als Erzeugungsoperatoren interpretiert werden können. Wie ist dann der Vakuumzustand  $|0\rangle$  definiert? Wie können Sie die Zustände  $|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$  aus dem Vakuumzustand  $|0\rangle$  gewinnen? (3 Punkte)