Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik

4. Mai 2009

Prof. Dr. A. Knorr
Dr. Ermin Malic,
Dipl.-Phys. Frank Milde

www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss09/wpfv/tfp/

3. Übungsblatt zur Theoretische Festkörperphysik

Abgabe: bis Dienstag 12.05.2009 10:15 Uhr in der Vorlesung.

Aufgabe 5 (10 Punkte): *Operatoren in zweiter Quantisierung*

In der VL wurden sowohl die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der quantisierten Gitterschwingung [$\hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}$, $\hat{b}_{j,\mathbf{q}}$ mit Wellenvektor $\mathbf{q}$ in Mode j (LA,LO,TA,TO)], als auch der Elektronen ($\hat{a}^\dagger_{\lambda,s,\mathbf{k}}$, $\hat{a}_{\lambda,s,\mathbf{k}}$ in Band λ, Spin s mit Wellenvektor $\mathbf{k}$) eingeführt.

1. Zeigen Sie explizit durch Einsetzen, dass die bosonische Kommutatorrelation $[\hat{b}_{i,\mathbf{q}}, \hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}'}] = i\hbar\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\delta_{i,j}$ erfüllt ist.

2. In der VL wurde gezeigt, dass der Erwartungswert der quantisierten Auslenkung $\langle\hat{u}\rangle$ verschwindet. Zeigen Sie, das im Gegensatz dazu die Standardabweichung $\sigma^2 = \langle(\langle\hat{u}\rangle - \hat{u})^2\rangle$ ungleich Null ist.

3. Zeigen Sie das in einem Reservoir von harmonischen Oszillatoren für den Erwartungswert
$$\langle\hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}\hat{b}_{j',\mathbf{q}'}\rangle = \mathrm{tr}\left(\hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}\hat{b}_{j',\mathbf{q}'}\hat{\rho}\right) = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\delta_{j,j'}f^{\mathsf{Bose}}_{\mathbf{q},j}$$
gilt. Dabei ist $f^{\mathsf{Bose}}_{\mathbf{q},j} = [\exp(\beta\hbar\omega_{\mathbf{q},j}) - 1]^{-1}$ die Bose Verteilungsfunktion und $\beta = (k_{\mathsf{B}}T)^{-1}$. Da das Bosonenreservoir ein Wärmebad darstellt, handelt es sich um ein kanonisches Ensemble. Nutzten Sie den entsprechenden statistischen Operator $\hat{\rho} = \exp(-\beta\hat{H}_{\mathsf{R}})/Z_{\mathsf{R}}$. Der Hamiltonoperator des wechselwirkungsfreien Bosonenreservoirs ist durch $\hat{H}_{\mathsf{R}} = \sum_{\mathbf{q},j}\hbar\omega_{\mathbf{q},j}\hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}\hat{b}_{j,\mathbf{q}}$ gegeben. Die Spur wirkt wie folgt:
$$\mathrm{tr}\,(\times) = \sum_{\{n_{\mathbf{q},j}\}}\langle n_{\mathbf{q}_1,j_1}|\langle n_{\mathbf{q}_2,j_2}|\langle\cdots|\times|\cdots\rangle|n_{\mathbf{q}_2,j_2}\rangle|n_{\mathbf{q}_1,j_1}\rangle.$$

4. Zeigen Sie das in einem nicht interagierenden Elektronengas (Einbandmodel) für den Erwartungswert
$$\langle\hat{a}^\dagger_{s,\mathbf{k}}\hat{a}_{s',\mathbf{k}'}\rangle = \mathrm{tr}\left(\hat{a}^\dagger_{s,\mathbf{k}}\hat{a}_{s',\mathbf{k}'}\hat{\rho}\right) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{s,s'}f^{\mathsf{Fermi}}_{\mathbf{q},j}$$
gilt. Hier ist s und s' der Elektronenspin, welcher die Werte $\pm 1/2$ annehmen kann. Die Fermi-Dirac Verteilungsfunktion ist durch $f^{\mathsf{Fermi}}_{\mathbf{q},j} = [\exp(\beta(\varepsilon_{\mathbf{q},j} - \mu)) + 1]^{-1}$ gegeben. Da nun auch Teilchenaustausch möglich ist, befinden wir uns in einem grosskanonischen Ensemble. Der statistischen Operator ist durch $\hat{\rho} = \exp(-\beta\hat{H}_{\mathsf{el}} - \mu\hat{N})/Z_{\mathsf{gk}}$ gegeben, wobei der Hamiltonoperator durch $\hat{H}_{\mathsf{el}} = \sum_{\mathbf{k},s}\varepsilon_{\mathbf{k},s}\hat{a}^\dagger_{s,\mathbf{k}}\hat{a}_{s,\mathbf{k}}$ definiert und $\hat{N}$ der Teilchenzahloperator ist.

Bitte Rückseite beachten!$\longrightarrow$

3. Übung TFP SS 09

Aufgabe 6 (10 Punkte): *Quantisierung der Elektron-Phonon Wechselwirkung*
Der Hamiltonoperator der Elektron-Phonon Wechselwirkung lautet in 2. Quantisierung:

$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{1,2} \sum_{n} \langle 1|\mathbf{u}_n \cdot \nabla_{\mathbf{R}_n} V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)|2\rangle\, \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2$$

(a) Zeigen Sie, daß gilt:

$$\hat{H}_{\text{el-ph}} = \sum_{\lambda,j,\mathbf{k},\mathbf{q}} D_{\mathbf{q}j} \left(\hat{b}^\dagger_{j,-\mathbf{q}} + \hat{b}_{j,\mathbf{q}}\right) \hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{q}+\mathbf{k}} \hat{a}_{\lambda,\mathbf{k}}$$
$$\text{mit } D_{\mathbf{q}j} = -i\left(\hbar/(2m\omega_{j,\mathbf{q}})\right)^{-1/2} \mathbf{A}_j \cdot \mathbf{q} V_{\mathbf{q}}$$

(b) Interpretieren Sie das Ergebnis anhand einer Skizze.
Vorgehensweise:

- Das periodische Potential $V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ als Fourierreihe $\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)} V_{\mathbf{k}}\right)$ schreiben.
- $\mathbf{u}_n$ aus der VL einsetzen und ∇ wirken lassen. n-Summe auswerten ($\rightarrow$Kronecker).
- Für $|2\rangle$ und $\langle 1|$ Blochfunktionen einsetzen und über Einheitszellen auswerten (noch mehr Kronecker).
- Nach Indexumbenennungen erhält man das Ergebnis.