Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik

15. Mai 2009

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

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

5. Übungsblatt zur Theoretische Festkörperphysik

Abgabe: bis Dienstag 26.05.2009 10:15 Uhr in der Vorlesung.

Aufgabe 8 (8 Punkte): *Das Independent Boson Model (IBM) – Teil 2*

Betrachten Sie die Fortsetzung von Aufgabe 7 des 4. Zettels. Es geht dabei um die Behandlung von mehr-Zeiten Erwartungswerten.

1. Betrachten Sie ein Bad aus thermischen Phononen und gehen Sie über ins **Wechselwirkungsbild**. Was bedeutet das für die Phononoperatoren, insbesondere für ihre Zeitabhängigkeit? Berechnen Sie nun für den Fall eines *operator*wertigen $\hat{\phi}(t) = \mathrm{i}\sum_{\mathbf{q},\mathrm{LO}}(g^{vv}_{\mathbf{q},\mathrm{LO}} - g^{cc}_{\mathbf{q},\mathrm{LO}})\left(\hat{b}^\dagger_{\mathrm{LO},-\mathbf{q}}(t) + \hat{b}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}}(t)\right)$ den zwei-Zeiten Erwartungswert von $\langle \hat{T}\hat{\phi}(t_1)\hat{\phi}(t_2)\rangle$ über das konkrete Ausmultiplizieren der $\hat{\phi}$ Produkte.

2. Zeigen Sie das folgende Vertauschung gilt:
$$\hat{b}^{0(\dagger)}_\alpha \hat{\rho}_{\mathrm{bad}} = \hat{\rho}_{\mathrm{bad}} \hat{b}^{0(\dagger)}_\alpha \exp\left[(+)/-\hbar\omega_\alpha\beta\right],$$
wobei $\hat{\rho}_{\mathrm{bad}} = \exp[-\beta\sum_{\mathbf{q}}\hbar\omega_{\mathbf{q}}\hat{b}^\dagger_{\mathbf{q}}\hat{b}_{\mathbf{q}}]$ ist.

3. Die analytische Lösung gibt folgende Zeitentwicklung:
$$\hat{p}(t) = p_0 \exp\left[\sum_{\mathbf{q}} \frac{|g^{vv}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}} - g^{cc}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}}|^2}{\hbar^2\omega^2_{\mathrm{LO}}}\{(n_{\mathbf{q}}+1)(e^{-\mathrm{i}\omega_{\mathrm{LO}}t}-1) + n_{\mathbf{q}}(e^{\mathrm{i}\omega_{\mathrm{LO}}t}-1) + \mathrm{i}\omega_{\mathrm{LO}}t\}\right]$$
Plotten Sie $p(t)$ mit einem Programm Ihrer Wahl (Gnuplot, Mathematica, Matlab, etc). Die Parameter sind $p_0 = 0.1$, $\sum_{\mathbf{q}}|g^{vv}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}} - g^{cc}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}}|^2 = 1.8\cdot 10^{-5}$ fs^{-2}, $\omega_{\mathrm{LO}} = 36$ meV, $\hbar = 0.658212$ eV fs, k_B =8.61745$\cdot 10^{-5}$ eV/K und $T = 10$ K.

   Im Fall von $T = 0$ K kann das Spektrum dargestellt werden als
$$S(\omega)|_{T=0} \sim \frac{1}{\hbar} e^{-|g^{vv}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}} - g^{cc}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}}|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|g^{vv}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}} - g^{cc}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}}|^{2m}}{m!}\delta(\omega - \omega_{\mathrm{gap}} - m\omega_{\mathrm{LO}}).$$
   Zeichnen und interpretieren Sie das Spektrum.

Bitte Rückseite beachten! ⟶

Aufgabe 9 (12 Punkte): *Korrelationsentwicklung der phonon-assistierten Dichtematrix*
In der VL und auf dem letzten Zettel wurde die Bewegungsgleichung der mikroskopischen Polarization $\hat{a}^\dagger_{v,\mathbf{k}}\hat{a}_{c,\mathbf{k}'}$ bereits betrachtet. Aufgrund der Wechselwirkung mit einem Vielteilchen-Hamiltonian koppelt diese Größe an höherwertige Operatoren, den phonon-assistierten Polarisationen. Deren dynamische Bewegungsgleichungen sollen Sie im folgenden Berechnen. Um das auftretende Hierachie-Problem (koppeln von N-Teilchen Operator an $(N+1)$-Teilchen Operator) zu behandeln, wenden Sie die Korrelationsentwicklung (siehe VL) an. Der Hamiltonoperator sei wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}^{\text{kin}}_{\text{el}} + \hat{H}^{\text{kin}}_{\text{pn}} + \hat{H}^{\text{WW}}_{\text{el-pn}} && (1)\\ &= \sum_{\lambda k} \varepsilon_{\lambda k}\hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}\hat{a}_{\lambda,\mathbf{k}} + \sum_{qj} \hbar\omega_{j,\mathbf{q}}\hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}\hat{b}_{j,\mathbf{q}} + \sum_{\lambda,\lambda',j,\mathbf{k},\mathbf{q}} g^{\lambda\lambda'}_{\mathbf{q},j}\left(\hat{b}^\dagger_{j,-\mathbf{q}} + \hat{b}_{j,\mathbf{q}}\right)\hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}+\mathbf{q}}\hat{a}_{\lambda,\mathbf{k}} && (2)\end{aligned}$$

1. Bestimmen Sie die Bewegungsgleichung von $\langle \hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}\hat{b}_{j,\mathbf{q}}\hat{a}_{\lambda',\mathbf{k}'}\rangle$ und $\langle \hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}\hat{b}^\dagger_{j,-\mathbf{q}}\hat{a}_{\lambda',\mathbf{k}'}\rangle$.

2. Wenden Sie bei den auftretenden 4er Termen die Korrelationsentwicklung an. Zeigen Sie ausgehend von der vollen Faktorisierung, dass $\langle \hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}\hat{a}_{\lambda',\mathbf{k}'}\hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}\hat{b}_{j',\mathbf{q}'}\rangle \approx \langle \hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}\hat{a}_{\lambda',\mathbf{k}}\rangle\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\langle \hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}\hat{b}_{j',\mathbf{q}'}\rangle\delta_{j,j'}\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$. Benutzen Sie dazu, dass sich keine kohärenten Phononen im System befinden, also $\langle \hat{b}^\dagger_{j,\mathbf{q}}\rangle = \langle \hat{b}_{j,\mathbf{q}}\rangle = 0$ (Badannahme) und das das System homogen angeregt wurde $\langle \hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}\hat{a}_{\lambda',\mathbf{k}'}\rangle = \langle \hat{a}^\dagger_{\lambda,\mathbf{k}}\hat{a}_{\lambda',\mathbf{k}}\rangle\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$.

3. Sie erhalten das gewünschte Ergebnis durch weiteres Vereinfachen der Gleichungen mit der Hartree-Fock-Faktorisierung für Elektronenerwartungswerte:

$$\langle \hat{a}^\dagger_1\hat{a}^\dagger_2\hat{a}_3\hat{a}_4\rangle \approx \langle \hat{a}^\dagger_1\hat{a}_4\rangle\langle \hat{a}^\dagger_2\hat{a}_3\rangle - \langle \hat{a}^\dagger_1\hat{a}_3\rangle\langle \hat{a}^\dagger_2\hat{a}_4\rangle$$

   Wenden sie auch hier wieder die Homogenitätsannahme an.