

# Theoretische Physik: Fortgeschrittene Quantentheorie, Übung 9

Prof. Dr. Alejandro Muramatsu WS 2014/15, 19. Dezember 2014

## 1. Matrixelemente von Zwei-Elektronen-Operatoren in 1. Quantisierung

Wir betrachten ein System von  $N$  Elektronen, die über Coulomb-Abstoßung miteinander wechselwirken. Wir nehmen an, dass wir durch Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Einteilchen-Problem einen vollständigen Satz von  $M$  orthonormierten Einteilchen-Wellenfunktionen  $\{\chi_i\}$  bestimmt haben.

( **Anm.:** Im folgenden soll der Spin-Anteil der Wellenfunktionen vernachlässigt werden, d.h. wir behandeln spinlose Fermionen. Man kann den Spin berücksichtigen, indem man Orts- und Spinanteil zu einem "Spin-Orbital" zusammenfasst, wobei dann maximal ein Elektron pro Spin-Orbital erlaubt ist und man doppelt so viele Spin-Orbitale wie ursprüngliche Orts-Orbitale erhält. An den folgenden Rechnungen würde sich nichts gegenüber spinlosen Fermionen ändern, außer dass man die  $M$  Orbitale durch  $2M$  Spin-Orbitale ersetzt.)

Aus den besetzten Orbitalen  $\chi_i(\vec{x}_1), \chi_j(\vec{x}_2), \dots, \chi_k(\vec{x}_N)$  wird eine Slater-Determinante für  $N$  Elektronen gebildet:

$$|K\rangle = |\chi_i\chi_j \cdots \chi_k\rangle = (N!)^{-1/2} \sum_{n=1}^{N!} (-1)^{p_n} \mathcal{P}_n \{\chi_i(1)\chi_j(2) \cdots \chi_k(N)\}, \quad (1)$$

wobei  $\mathcal{P}_n$  die  $n$ -te Permutation bezeichnet und  $p_n$  die Anzahl der Transpositionen.

Wir wollen die Matrixelemente des paarweisen Wechselwirkungsterms

$$\hat{V}_2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1} \quad (2)$$

zwischen beliebigen Slater-Determinanten  $|K\rangle$  und  $|L\rangle$  bestimmen.

- a) Da Slater-Determinanten nicht zwischen identischen Elektronen unterscheiden, ergibt jeder Term in der Summe (2) das gleiche Matrixelement, und wir können den Operator  $\hat{V}_2$  z.B. durch  $r_{12}^{-1}$  ersetzen, wenn wir mit der Anzahl der Elektronenpaare multiplizieren. Zeige explizit, dass zwischen zwei Slater-Determinanten gilt:

$$\begin{aligned} \langle K | \hat{V}_2 | L \rangle &= \langle K | r_{12}^{-1} + r_{13}^{-1} + r_{14}^{-1} + \cdots + r_{23}^{-1} + r_{24}^{-1} + \cdots + r_{N,N-1}^{-1} | L \rangle \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \langle K | r_{12}^{-1} | L \rangle \end{aligned}$$

Führe das Integral über  $N$  Elektronen-Koordinaten unter Ausnutzung der Orthogonalität der Orbitale auf Integrale über zwei Elektronen-Koordinaten zurück und zeige:

b) für den Fall identischer Slater-Determinanten

$$\langle K|\hat{V}_2|K\rangle = \frac{1}{2} \sum_m^N \sum_{n \neq m}^N \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \chi_m^*(1) \chi_n^*(2) r_{12}^{-1} (1 - \mathcal{P}_{12}) \{\chi_m(1) \chi_n(2)\} \quad (3)$$

c) falls sich  $|K\rangle = |\chi_m(1) \chi_n(2) \dots\rangle$  und  $|L\rangle = |\chi_p(1) \chi_n(2) \dots\rangle$  in einem Orbital unterscheiden ( $m \leftrightarrow p$ )

$$\langle K|\hat{V}_2|L\rangle = \sum_{n \neq m}^N \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \chi_m^*(1) \chi_n^*(2) r_{12}^{-1} (1 - \mathcal{P}_{12}) \{\chi_p(1) \chi_n(2)\} \quad (4)$$

d) falls sich  $|K\rangle = |\chi_m(1) \chi_n(2) \dots\rangle$  und  $|L\rangle = |\chi_p(1) \chi_q(2) \dots\rangle$  in zwei Orbitalen unterscheiden ( $m, n \leftrightarrow p, q$ )

$$\langle K|\hat{V}_2|L\rangle = \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \chi_m^*(1) \chi_n^*(2) r_{12}^{-1} (1 - \mathcal{P}_{12}) \{\chi_p(1) \chi_q(2)\} \quad (5)$$

e) falls sich  $|K\rangle$  und  $|L\rangle$  in mehr als zwei Orbitalen unterscheiden

$$\langle K|\hat{V}_2|L\rangle = 0. \quad (6)$$

## 2. 2-Site Hubbard-Modell

Wir betrachten das Hubbard-Modell

$$H = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + V \sum_i c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow} c_{i,\uparrow}$$

für zwei Plätze.

- Wir beschränken uns im folgenden auf Zustände mit zwei Teilchen und verschwindender Magnetisierung  $S_z = 0$ . Welches sind diese Zustände?
- Diagonalisiere den Hamiltonian in diesem Unterraum, das heißt berechne die Eigenenergien und Eigenzustände. Plote die Zwei-Teilchen-Energien in Einheiten des Hopping-Parameters  $|t|$  und als Funktion des Wechselwirkungsparameters  $V$ .
- Schreibe den Wechselwirkungsterm um in Mean-Field Näherung  $AB = A\langle B\rangle + \langle A\rangle B - \langle AB\rangle$  mit halber Füllung  $\langle n_{i\sigma} \rangle = 1/2$  und vergleiche die Grundzustandsenergie mit der exakten Lösung.

## 3. Wechselwirkende Spin-1/2 Systeme

(a) Wir betrachten zunächst ein System aus drei Spin-1/2. Gebe die Dimension des Hilbertraums an.

Die Operatoren  $\vec{S}^{(i)}$  bzw.  $S_z^{(i)}$  seien wie üblich definiert und wirken nur auf den  $i$ . Spin. Wir definieren weiterhin den Gesamtspin und dessen  $z$ -Komponente durch

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^3 \vec{S}^{(i)}, \quad S_z = \sum_{i=1}^3 S_z^{(i)}.$$

Gebe die Eigenzustände und zugehörigen Eigenwerte der Operatoren  $S^2 = \vec{S}^2$  und  $S_z$  an.

(b) Betrachte nun den Hamiltonoperator

$$H = J \sum_{i=1}^3 \vec{S}^{(i)} \cdot \vec{S}^{(i+1)}, \quad J > 0.$$

wobei wir periodische Randbedingungen annehmen ( $i + 1 = 1$  für  $i = 3$ ).  
Berechne die Eigenzustände und zugehörige Eigenenergien.

(c) Wiederhole Teil (a) für 4 Spins und gebe den Grundzustand eines entsprechend definierten Hamiltonoperators  $H = J \sum_{i=1}^4 \vec{S}^{(i)} \cdot \vec{S}^{(i+1)}$  an, wobei nun der 5. Spin wieder mit dem ersten identifiziert wird (periodische Randbedingungen).