Technische Universität Wien

PD Dr. J. Tomczak, Prof. A. Toschi, Prof. K. Held

5. Übung zur Quantentheorie II

Wintersemester 2019/2020

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 17.01.2019.

14. Hartree-Fock für kalte Atome

1+1+2+1+1=6 Punkte

Wir betrachten zwei Spin-1/2 Atome in einer durch Laserstrahlen erzeugten optischen Falle. Einfachheitshalber betrachten wir nur eine Dimension und approximieren das Potential der Falle sowie die—i.d.R. kompliziertere—Wechselwirkung der Atome als parabolisch. Der Hamiltonoperator in dimensionslosen Einheiten lautet dann:

$$H = \frac{1}{2}(-\Delta_{\mathbf{r}_1} + \mathbf{r}_1^2) + \frac{1}{2}(-\Delta_{\mathbf{r}_2} + \mathbf{r}_2^2) + \frac{U}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2 \ . \tag{1}$$

Das System sei soweit abgekühlt, dass wir uns auf den Grundzustand beschränken können. Durch Zerlegung in Relativ- und Schwerpunktkoordinaten läßt sich das Problem exakt lösen mit Grundzustandsenergie $E = \frac{3}{2}(1 + \sqrt{1 + 2U})$.

a) Bilden Sie den Hartree-Fock-Ansatz $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sqrt{2}\mathcal{A}[\phi(\mathbf{r}_1)|\uparrow\rangle_1 \phi(\mathbf{r}_2)|\downarrow\rangle_2]$. Warum?

b) Wie lautet für dieses Problem die Hartree-Fock-Gleichung?

c) Lösen Sie die Hartree-Fock-Gleichung mit einem geeigneten Ansatz für $\phi(\mathbf{r})$.

d) Berechnen Sie die Hartree-Fock-Energie.

e) Vergleichen Sie die Hartree-Fock-Energie und die exakte Energie bis zur 2. Ordnung in U.

15. Normierungsfaktor für Bosonen

2 Punkte

Bestimmen Sie den Normierungsfaktor c für die Besetzungszahlbasisfunktionen im Falle von Bosonen, d.h.

$$|n_1, n_2, \ldots, \rangle = c\, \mathcal{S}|\phi_{\alpha_1}\rangle|\phi_{\alpha_2}\rangle \ldots |\phi_{\alpha_N}\rangle \tag{2}$$

mit geeignetem c, so dass $\langle n_1', n_2' \ldots | n_1, n_2, \ldots, \rangle = \delta_{n_1', n_1}\ \delta_{n_2', n_2}\ \ldots$

16. Nickelat-Supraleiter *1+1+1+2+2=7 Punkte*

Dieses Jahr wurde der neuartige Nickelat-Supraleiter $Nd_{0.8}Sr_{0.2}NiO_2$ gefunden. Entscheidend für die Supraleitung scheinen dabei die Elektronen in den Ni d-Orbitalen zu sein. Von diesen spielt insbesondere das Ni $x^2 - y^2$ Orbital [im folgenden $\psi_{x^2-y^2}(\mathbf{r}) \equiv \psi_1(\mathbf{r})$] und evtl. auch das Ni $3z^2 - r^2$-Orbital [$\psi_{z^2}(\mathbf{r}) \equiv \psi_2(\mathbf{r})$] eine Rolle. Diese sind natürlich noch um den Spinanteil $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ zu ergänzen. Wir wollen hier nur einen einzigen Ni-Gitterplatz und auch nur diese beiden Orbitale betrachten. Den Hamilton-Operator können wir in 2. Quantisierung schreiben als

$$\begin{aligned} H \quad = \quad & \Delta \sum_\sigma c^\dagger_{1\sigma} c_{1\sigma} + U \sum_i c^\dagger_{i\uparrow} c_{i\uparrow} c^\dagger_{i\downarrow} c_{i\downarrow} + \sum_{\sigma\sigma'} (U' - J\delta_{\sigma\sigma'}) c^\dagger_{1\sigma} c_{1\sigma} c^\dagger_{2\sigma'} c_{2\sigma'} \\ & - J \sum_{i \neq i'} c^\dagger_{i\uparrow} c_{i\downarrow} c^\dagger_{i'\downarrow} c_{i'\uparrow} + J' \sum_{i\neq i'} c^\dagger_{i\uparrow} c^\dagger_{i\downarrow} c_{i'\downarrow} c_{i'\uparrow} \, . \end{aligned} \tag{3}$$

Hierbei bezeichnet $c_{i\sigma}$ ($c^\dagger_{i\sigma}$) den Vernichtungs-(Erzeugungs)-Operator für ein Elektron in Orbital i mit Spin σ.

a) Drücken Sie alle Zweiteilchenterme durch Integrale der Coulomb-Wechselwirkung mit den Orbitalen $\psi_i(\mathbf{r})$ aus. Dafür ist es evtl. sinnvoll, die Zweiteilchenterme unter Verwendung der fermionischen Kommutationsrelationen zunächst in die normalgeordnete Form zu bringen (d.h. alle Erzeugungsoperatoren stehen links von den Vernichtungsoperatoren).

b) Welche der Wechselwirkungen U, U', J, J' wird am größten (am kleinsten) sein? Interpretieren Sie den Einteilchenterm Δ und die Zweiteilchenterme physikalisch.

c) Warum ist $J = J'$, wenn $H = H^*$ (d.h. kein Magnetfeld)?

d) Zeigen Sie mit Hilfe der fermionischen Kommutationsrelationen, dass H mit dem Gesamt-Spin-z-Operator $S_Z = \frac{1}{2}\sum_i (c^\dagger_{i\uparrow} c_{i\uparrow} - c^\dagger_{i\downarrow} c_{i\downarrow})$ kommutiert ($\hbar = 1$).

e) Geben Sie die Eigenenergien des Hamiltonians für zwei Elektronen an. Hierfür können Sie Basisfunktionen der Form $c^\dagger_{i\sigma} c^\dagger_{i'\sigma'}|0\rangle$ bilden und den Hamilton-Operator als Matrix in dieser Basis darstellen. Die Information aus d) kann hierfür hilfreich sein.

Hinweis: Fermionische Antikommutationsrelationen: $\{c^\dagger_{i\sigma}, c_{i'\sigma'}\} \equiv c^\dagger_{i\sigma} c_{i'\sigma'} + c_{i'\sigma'} c^\dagger_{i\sigma} = \delta_{i,i'}\delta_{\sigma,\sigma'}$, $\{c^\dagger_{i\sigma}, c^\dagger_{i'\sigma'}\} = \{c_{i\sigma}, c_{i'\sigma'}\} = 0$.
Es sind viele Kommutatoren zu berechnen. Nachdem Sie dies bei einigen im Detail gemacht und das Prinzip verstanden haben, sollten Sie versuchen, sich eine effiz iente Berechnung und Schreibweise anzueignen.

Frohe Weihnachten und viel Erfolg im Neuen Jahr!