Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik

11. Juni 2009

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

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

9. Übungsblatt zur Theoretische Festkörperphysik

Abgabe: bis Dienstag 16.06.2009 10:15 Uhr in der Vorlesung.

Aufgabe 16 (10 Punkte): *Hartree-Fock Faktorisierung*
Zeigen Sie die Hartree-Fock Faktorisierung für fermionische Opertoren $a^\dagger, a$:

$$\mathrm{tr}(a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m \rho(t)) \approx \mathrm{tr}(a_i^\dagger a_m \rho(t)) \mathrm{tr}(a_j^\dagger a_l \rho(t)) - \mathrm{tr}(a_i^\dagger a_l \rho(t)) \mathrm{tr}(a_j^\dagger a_m \rho(t)) \tag{1}$$

unter der Annahme das zu jeder Zeit die Dichtematrix als generalisierter kanonischer statistischer Operator von Einteilchenobservablen dargestellt werden kann (Erklärung in Übung):

$$\rho(t) \approx \frac{1}{Z} e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j} \qquad Z = \mathrm{tr}(e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j}),$$

wobei die Matrix λ_{ij} hermitisch ist ($\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j$ sind Observablen).
Dazu:
(1) Führen Sie die unitäre Matrix ϕ ein, die die Matrix λ diagonalisiert: $\lambda_{dia} = \phi \lambda \phi^*$ und transformieren Sie die Operatoren

$$b_i = \sum_k \phi_{ik} a_k \qquad b_i^\dagger = \sum_k \phi_{ki}^* a_k^\dagger$$

in der Definition der Dichtematrix.
(2) Berechnen Sie

$$\mathrm{tr}(a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m \rho(t)) = \sum_{hkpq} \phi_{hi} \phi_{kj} \phi_{lp}^* \phi_{mq}^* \sum_{\{n_i\}} \frac{1}{Z} (\delta_{hq} n_h \delta_{kp} n_k - \delta_{hp} n_h \delta_{kq} n_k) \Pi_w e^{-\lambda_w n_w}$$

unter Verwendung der Definition der Spur

$$\mathrm{tr}(\dots) = \sum_{\{n_i\}} \langle n_1, n_2, \dots | \dots | n_1, n_2, \dots \rangle$$

für einen vollständigen Satz von Besetzungszahlen.
(3) Berechnen Sie analog zu (2) :

$$\mathrm{tr}(a_i^\dagger a_j \rho(t)) = \sum_k \frac{\phi_{ki} \phi_{jk}^* e^{-\lambda_k}}{1 + e^{-\lambda_k}}$$

(4) Kombinieren Sie die Ergebnisse aus (3) und (4) um das Endergebnis Gl. (1) zu beweisen.

Bitte Rückseite beachten!⟶

Aufgabe 17 (10 Punkte): *Coulombwechselwirkung in zweiter Quantisierung*
In dieser Aufgabe soll die Einführung der Coulombwechselwirkung als typischer Zwei-Teilchenoperator nachvollzogen werden.
Das Matrixelement der abgeschirmten Coulombwechselwirkung lautet:

$$V_{1,2,3,4} = \langle 1| \langle 2| \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |3\rangle |4\rangle$$

mit den Elektronenzuständen:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \left| s_n^{(i)} \right\rangle e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{r}_n} \quad \text{mit } \; i = 1, 2.$$

Wobei $\mathbf{k}$ Wellenzahl- und $\mathbf{r}$ Ortsvektoren sind und $s_n^{(i)}$ der zugehörige Spin. Zeigen Sie, dass für ein endliches Volumen V:

$$V_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4}^{s_1,s_2,s_3,s_4} = \lim_{\alpha \to 0} \frac{e^2}{V\varepsilon_0 \left(|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|^2 + \alpha^2 \right)} \delta_{s_1,s_3} \delta_{s_2,s_4} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$$

gilt.

Folgendes Vorgehen führt zum Ziel:

1. Führen Sie im Integral einen konvergenzerzeugenden Faktor ein ($\sim e^{-\alpha}$).
2. Transformieren Sie zu Relativ- und Schwerpunktskoordinaten $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}', \; \mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$.
3. $\int d^3R$-Integral ausführen (ergibt $V\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_4}$).
4. $\int d^3s$-Integral in (passende!) Kugelkoordinaten umschreiben und lösen. Fertig!

Tipps:

$$\int_0^\pi e^{-ia\cos x} \sin x dx = 2\frac{\sin a}{a}$$

$$\int_0^\infty e^{-ax} \sin bx dx = \frac{b}{a^2 + b^2}$$

$$\delta\left(\mathbf{k} - \mathbf{k}'\right) = \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$$