Dr. Ermin Malic
Dr. Marten Richter
Dipl. Phys. Julia Kabuß

6. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I+II

Abgabe: Mi. 29.05.2013 vor Beginn der Vorlesung im EW 203
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte Matrikelnummer auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 9 (8 Punkte): *Hartree-Fock Faktorisierung*

Zeigen Sie die Hartree-Fock Faktorisierung für fermionische Opertoren $a^\dagger, a$:

$$\begin{aligned}(1)\qquad \mathrm{tr}(a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m \rho(t)) &\approx \mathrm{tr}(a_i^\dagger a_m \rho(t))\mathrm{tr}(a_j^\dagger a_l \rho(t)) - \mathrm{tr}(a_i^\dagger a_l \rho(t))\mathrm{tr}(a_j^\dagger a_m \rho(t)),\\ \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m\rangle &\approx \langle a_i^\dagger a_m\rangle\langle a_j^\dagger a_l\rangle - \langle a_i^\dagger a_l\rangle\langle a_j^\dagger a_m\rangle,\end{aligned}$$

unter der Annahme, dass 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.