Dr. Marten Richter
Dr. Julia Kabuß

7. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I+II

Abgabe: Mo. 08.06.2015 vor Beginn der Übung im EW 226
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 11 (10 Punkte): *Coulombwechselwirkung in zweiter Quantisierung*

In dieser Aufgabe soll die Einführung der Coulombwechselwirkung als typischer Zwei-Teilchenoperator aus der VL nachvollzogen werden.
Das Matrixelement der abgeschirmten Coulombwechselwirkung lautet:

$$V_{1,2,3,4} = e^2 \int d^3r \int d^3r' \vec{\varphi}_1^*(\vec{r}) \cdot \vec{\varphi}_4(\vec{r}) \frac{\vec{\varphi}_2^*(\vec{r}') \cdot \vec{\varphi}_3(\vec{r}')\, e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi\varepsilon_0 \, |\vec{r}-\vec{r}'|}$$

mit den Elektronenzuständen:

$$\vec{\varphi}_n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{\chi}_{m_{s_n}} e^{i\vec{k}_n\vec{r}} \quad \text{mit} \quad m_s \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}.$$

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

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

gilt.

Folgendes Vorgehen führt zum Ziel:

1. Transformieren Sie zu Relativ- und Schwerpunktskoordinaten $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$, $\vec{R} = (\vec{r} + \vec{r}')/2$.
2. $\int d^3R$-Integral ausführen (ergibt $V\delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_3,\vec{k}_2+\vec{k}_4}$).
3. $\int d^3s$-Integral in (passende!) Kugelkoordinaten umschreiben und lösen. Fertig!

Tipps:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = ab\cos\vartheta \qquad \text{mit} \qquad \vartheta = \measuredangle\left(\vec{a}, \vec{b}\right)$$

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

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

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

7. Übung TFKP SS15

Aufgabe 12 (10 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 2. und 3. um das Endergebnis Gl. (1) zu beweisen.