Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik 6. Januar 2017

Prof. Dr. Andreas Knorr
Dr. Alexander Carmele, Andreas Koher, Alexander Kraft

9. Übungsblatt – Quantenmechanik II

Abgabe: Di. 24.01.2017 um 8.15 Uhr, Beginn der Vorlesung!
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 17 (20 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 der 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: $\lambda^{dia} = \phi \lambda \phi^{-1}$ 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

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

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) :

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

(4) Kombinieren Sie die Ergebnisse aus (2) und (3) um das Endergebnis Gl. (1) zu beweisen.