

2. Übungsblatt zur Theoretischen Festkörperphysik

Abgabe: bis Dienstag 8.05.2007 10:15 Uhr in der Vorlesung.

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte!

Aufgabe 3 (10 Punkte): Hartree-Fockfaktorisierung

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

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

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

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

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

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

in der Definition der Dichtematrix.

(2) Berechnen Sie

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

unter Verwendung der Definition der Spur

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

für einen vollständigen Satz von Besetzungszahlen.

(3) Berechnen Sie analog zu (2) :

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

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

Bitte Rückseite beachten! →

2. Übung TFKP SS 07

Aufgabe 4 (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:

$$V_{1,2,3,4} = \langle 1 | \langle 2 | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\underline{r} - \underline{r}'|} | 3 \rangle | 4 \rangle$$

mit den Elektronenzuständen:

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

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

$$V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}^{s_1, s_2, s_3, s_4} = \frac{e^2}{V\epsilon_0 \left(|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|^2 + \alpha^2 \right)} \delta_{s_1, s_3} \delta_{s_2, s_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$$

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 $\underline{s} = \underline{r} - \underline{r}'$, $\underline{R} = (\underline{r} + \underline{r}')/2$.
3. $\int d^3R$ -Integral ausführen (ergibt $V \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$).
4. $\int d^3s$ -Integral in (passende!) Kugelkoordinaten umschreiben und lösen. Fertig!

Tipps:

$$\underline{a} \cdot \underline{b} = ab \cos \vartheta \quad \text{mit} \quad \vartheta = \angle(\underline{a}, \underline{b})$$

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

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

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