

Prof. Dr. Andreas Knorr  
 Dr. Alexander Carmele  
 Dr. Florian Wendler

## 2. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

**Abgabe: Mo. 16.05.2016 bis 10:00 Uhr in der Übung**

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Zweiergruppen erfolgen.

**Aufgabe 2 (20 Punkte): Hartree-Fock Faktorisierung**

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

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

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  $\lambda_{ij}$  hermitisch ist ( $\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j$  sind Observablen).

Dazu:

(1) Führen Sie die unitäre Matrix  $\phi$  ein, die die Matrix  $\lambda$  diagonalisiert:  $\lambda^{dia} = \phi \lambda \phi^{-1}$  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

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

unter Verwendung der Definition der Spur

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

für einen vollständigen Satz von Besetzungszahlen.

(3) Berechnen Sie analog zu (2) :

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

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

## 2. Übung TPVI SS2016

<b>Vorlesung:</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Dienstag 8:15 Uhr – 10:00 Uhr im EW 203</li><li>• Donnerstag 8:15 Uhr – 10:00 Uhr im EW 203</li></ul>
<b>Übung:</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Mo 10:15-11:45 EW 731</li></ul>
<b>Scheinkriterien:</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Mindestens 60% der Übungspunkte.</li></ul>
<b>Zettel:</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ausgabe: Montags in der Übung.</li><li>• Abgabe: 14 Tage später in der Übung .</li><li>• Abgabe der Übungszettel in 2- oder 3-er Gruppen!</li></ul>
<b>Sprechzeiten:</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Prof. Dr. Andreas Knorr: Di, 13–14 Uhr im EW 742</li><li>• Dr. Alexander Carmele : Fr, 10–11 Uhr im EW 704</li><li>• Dr. Florian Wendler : Mo, 12–13 Uhr im ER 221</li></ul>
<b>Literatur</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ashcroft, Mermin: Festkörperphysik (Oldenbourg)</li><li>• Czycholl: Theoretische Festkörperphysik (Springer)</li><li>• Haken: Quantenfeldtheorie des Festkörpers (Teubner)</li><li>• Haug, Koch: Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors (World Scientific)</li><li>• Ibach, Lüth: Festkörperphysik (Springer)</li><li>• Jäger, Valenta: Festkörpertheorie (Wiley)</li><li>• Kittel: Quantenfeldtheorie des Festkörpers (Oldenbourg)</li><li>• Rössler: Solid State Theory (Springer)</li><li>• Scherz: Quantenmechanik (Teubner)</li><li>• Ziman: Prinzipien der Festkörpertheorie (Deutsch)</li></ul>