

Prof. Dr. Kathy Lüdge
Dr. Alexander Carmele

7. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 10.06.2019 zum Vorlesungsbeginn

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

Aufgabe 11 (20 Punkte): Hartree-Fock Faktorisierung

Zeigen Sie die Hartree-Fock Faktorisierung für fermionische Operatoren $\{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij}$:

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

unter der Annahme, dass die fermionische Dichtematrix als generalisierter kanonischer statistischer Operator (GKSO) von Einteilchenobservablen dargestellt werden kann:

$$(2) \quad \rho(t) \approx \rho_F = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j}, \quad Z = \text{tr}(e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} a_i^\dagger a_j}),$$

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

Dazu:

(a) Führen Sie die unitäre Matrix ϕ ein, die die Matrix λ diagonalisiert. Der GKSO lautet nun $\rho_F = \frac{1}{Z} e^{-\sum_n \bar{\lambda}_n b_n^\dagger b_n}$. Geben Sie die Operatoren b_n^\dagger, b_n explizit in Abhängigkeit von a_i, a_j^\dagger an!

(b) Berechnen Sie die Zustandssumme Z 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 und $n_i = 0, 1$.

(c) Berechnen Sie $\langle b_n^\dagger b_m \rangle$. Benutzen Sie das Resultat, um $\text{tr}(a_i^\dagger a_j \rho(t))$ zu approximieren.

(d) Berechnen Sie nun $\langle b_n^\dagger b_p^\dagger b_q b_m \rangle$. Ermitteln Sie daraus den gewünschten Ausdruck für die Zwei-Teilchen-Korrelation im Gleichgewicht:

$$(3) \quad \text{tr} \left(a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_m \rho \right) \approx \sum_{hkpq} \phi_{hi} \phi_{kj} \phi_{lp}^* \phi_{mq}^* \sum_{\{n_i\}} \frac{1}{Z} n_h n_k (\delta_{hq} \delta_{kp} - \delta_{hp} \delta_{kq}) \prod_w e^{-\sum_r \bar{\lambda}_r n_r}.$$

Schreiben Sie das Ergebnis in Form von Erwartungswerten aus (b).

(e) Diskutieren Sie das Ergebnis. Worin besteht die Näherung? Wie müsste der GKSO aussehen, um über das Hartree-Fock-Limit hinaus Rechnungen anstellen zu können? Wo geht die Temperatur ein?

7. Übung TFP SS19

- Vorlesung:**
- Montags 10–12 Uhr im EW 202
 - Mittwochs 10–12 Uhr im EW 202

- Übungen:**
- Mi 16–18 Uhr im EW 229

- Scheinkriterien:**
- Mindestens 60% der Übungspunkte
 - Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Übungen

Literatur zur Lehrveranstaltung:

- Ashcroft, Mermin, *Festkörperphysik* (Oldenbourg)
- Kittel, *Quantentheorie der Festkörper* (Oldenbourg)
- Czocholl, *Theoretische Festkörperphysik* (Springer)
- Ibach, Lüth, *Festkörperphysik* (Springer)
- Jäger, Valenta, *Festkörpertheorie* (Wiley)
- U. Rössler, *Solid State Theory* (Springer)
- Haug, Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific)
- Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers* (Teubner)
- Scherz, *Quantenmechanik* (Teubner)

Sprechzeiten:	Name	Tag	Zeit	Raum
	Prof. Dr. K. Lüdge	Mi	13-14 Uhr	EW 741
	Dr. A. Carmele	Di	11-12 Uhr	EW 704

Hinweise:

Die Übungsblätter werden in der Regel am Montag in der Vorlesung ausgegeben. Die Abgabe erfolgt dann 14 Tage später Montags zu Vorlesungsbeginn.