

Prof. Dr. Andreas Knorr
 Dr. Carsten Weber
 Dipl. Phys. Alexander Carmele
 Dipl. Phys. Ken Lichtner

6. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Fr. 03.12.2010 12:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

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

Aufgabe 16 (13 Punkte): Hartree-Fock Faktorisierung

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

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

unter der Annahme, dass zu jeder Zeit die Dichtematrix als generalisierter kanonischer statistischer Operator von Einteilchenobservablen dargestellt werden kann (Erklärung im Tutorium):

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

wobei die Matrix λ_{ij} hermitesch 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

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

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):

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

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

Bitte Rückseite beachten! →

6. Übung TPV WS10/11

Aufgabe 17 (7 Punkte): *Coulombwechselwirkung in zweiter Quantisierung*

In dieser Aufgabe soll die Einführung der Coulombwechselwirkung als typischer Zwei-Teilchenoperator nachvollzogen werden.

Das Matrixelement der abgeschirmten Coulombwechselwirkung lautet

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

mit den Elektronenzuständen

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

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

$$V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}^{s_1, s_2, s_3, s_4} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{e^2}{V\epsilon_0 (|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|^2 + \alpha^2)} \delta_{s_1, s_3} \delta_{s_2, s_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$$

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 $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$.
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:

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

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

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