Prof. Sabine Klapp
Dr. Alexander Carmele, Dr. Javier Cerrillo, Malte Selig

10. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Do. 17.01.2019 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 19 (20 Punkte): *Hartree-Fock Faktorisierung*

Zeigen Sie die Hartree-Fock Faktorisierung für fermionische Operatoren $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ im Zustand i:

$$\mathrm{tr}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m \hat{\rho}(t)) \approx \mathrm{tr}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m \hat{\rho}(t))\mathrm{tr}(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{\rho}(t)) - \mathrm{tr}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \hat{\rho}(t))\mathrm{tr}(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{\rho}(t)). \tag{1}$$

Dabei macht man die Annahme, dass die Dichtematrix $\hat{\rho}(t)$ zu jeder Zeit als generalisierter kanonischer statistischer Operator von Einteilchenobservablen dargestellt werden kann (Erklärung in Übung):

$$\hat{\rho}(t) \approx \frac{1}{Z} e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j} \qquad Z = \mathrm{tr}(e^{-\sum_{ij} \lambda_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j}),$$

wobei die Matrix λ_{ij} hermitisch ist ($\sum_{ij} \lambda_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ sind Observablen) und Z die Zustandssumme bezeichnet.
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

$$\hat{b}_i = \sum_k \phi_{ik} \hat{a}_k \qquad \hat{b}_i^\dagger = \sum_k \phi_{ki}^* \hat{a}_k^\dagger$$

in der Definition der Dichtematrix. Berechnen Sie weiterhin Z explizit 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.
(2) Berechnen Sie

$$\mathrm{tr}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m \hat{\rho}(t)) = \sum_{hkpq} \phi_{hi} \phi_{kj} \phi_{lp}^* \phi_{mq}^* \sum_{\{n_i\}} \frac{1}{Z} n_h n_k (\delta_{hq}\delta_{kp} - \delta_{hp}\delta_{kq}) \Pi_w e^{-\lambda_w^{dia} n_w}.$$

(3) Berechnen Sie analog zu (2) :

$$\mathrm{tr}(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{\rho}(t)) = \sum_k \frac{\phi_{ki} \phi_{jk}^* e^{-\lambda_k^{dia}}}{1 + e^{-\lambda_k^{dia}}}.$$

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