

Übungen zur theoretischen Festkörperphysik II - Zettel 2

Sommersemester 2011

Abgabe: 03.05.

Aufgabe 4: Hamiltonoperator mit Kontaktwechselwirkung 6P.

Für Elektronen auf einem quadratischen Gitter mit der Gitterkonstanten a sind die lokalisierte Einteilchenwellenfunktionen gegeben durch $\psi_{i,\sigma}(\vec{r}) = \chi_\sigma \phi_i(\vec{r})$, wobei $\phi_i(\vec{r}) = \phi(\vec{r} - \vec{R}_i)$ der am Gitterplatz \vec{R}_i lokalisierte Ortsanteil und χ_σ der Spinanteil ist. Der Hamiltonian in der Basis dieser Einteilchenfunktionen sei gegeben durch

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{k,\sigma'} c_{l,\sigma}$$

mit den Matrixelementen t_{ij} und V_{ijkl} . Mit der Annahme, dass der Überlapp der Wellenfunktionen $\phi_i(\vec{r})$ an verschiedenen Gitterplätzen nur sehr klein ist, machen wir folgende Näherungen:

$$t_{ij} = \begin{cases} w & \text{für } i = j \\ t & \text{für } i \text{ und } j \text{ nächste Nachbarplätze} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$V_{ijkl} = V_{ij} \delta_{il} \delta_{jk} \quad \text{mit} \quad V_{ij} = \int d^3x \int d^3y |\phi_i(\vec{x})|^2 V(\vec{x}, \vec{y}) |\phi_j(\vec{y})|^2$$

a) Berechnen Sie das Matrixelement V_{ij} für eine Kontaktwechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \lambda \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2).$$

Die zugehörigen Wellenfunktionen sind durch Gauß-Funktionen gegeben

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{b^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{3}{4}}} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{2b^2}\right).$$

Unterscheiden Sie dabei zwischen den 2 relevanten Fällen, nämlich der *on-site* Wechselwirkung für $i = j$ und der nächsten Nachbarwechselwirkung. Schreiben Sie den Hamiltonoperator auf. Hinweis: Um auftretende Integrale zu lösen, kann man Maple, Mathematica o.ä. benutzen.

b) Welche Wechselwirkung dominiert im Fall Limes $b \ll a$? Wie lautet dann der Hamiltonoperator? Welches Modell haben Sie gerade hergeleitet?

Aufgabe 5: Hartree-Fock für 2 Teilchen 4P.

Betrachten wir ein System mit nur 2 Teilchen und dem Hamiltonoperator

$$H = h(\vec{r}_1) + h(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

mit $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ und der zugehörigen antisymmetrisierten Wellenfunktion

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_n(\vec{r}_1) \phi_m(\vec{r}_2) - \phi_m(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_2)).$$

Berechnen Sie damit den Erwartungswert $\langle \psi | H | \psi \rangle$ und identifizieren Sie den Hartree- und den Fock-Anteil.

Aufgabe 6: Grundzustandsenergie im Jellium-Modell 10+1P.

Wir betrachten ein homogenes Elektronengas im Jellium-Modell. Dabei nehmen wir an, dass eine homogen verteilte, positive Hintergrundladung mit dem Potential

$$V_0(\vec{r}) = -e \int d^3r' \frac{\rho_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -V_H(\vec{r})$$

wirkt. Beim homogenen Elektronengas hebt sich diese genau gegen den Hartree-Beitrag weg, so dass nur der Fock-Anteil übrig bleibt. Wir wollen die Energie des Elektronengases mit

$$E_{HF} = E^{(0)} + E^{(1)} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \langle \vec{k} | H_0 | \vec{k} \rangle - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma} \langle \vec{k} \vec{k}' | v | \vec{k} \vec{k}' \rangle$$

mit $\langle \vec{k} | H_0 | \vec{k} \rangle = \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und $\langle \vec{k} \vec{k}' | v | \vec{k} \vec{k}' \rangle = e^2 / (V \epsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|^2)$ betrachten und die Energie des Grundzustands berechnen. Im Grundzustand sind alle Zustände innerhalb der Fermi-Kugel mit dem Radius k_F (k_F ist der Fermi-Wellenvektor) vollständig besetzt und es gilt $\varepsilon(k) \leq \varepsilon_F = \varepsilon(k_F)$. Alle Summationen in dieser Aufgabe laufen daher über die Zustände innerhalb der Fermikugel. Zusätzlich wollen wir die Abkürzung für die Elektronendichte n_e benutzen und den Dichteparameter r_s einführen mit

$$n_e = \frac{N}{V} = \frac{3}{4\pi} \frac{1}{a_B^3 r_s^3}$$

mit dem Bohrschen Radius $a_B = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / (me^2)$.

- Rechnen Sie zur Vorbereitung die hilfreiche Relation $N = \sum_{\vec{k}, \sigma} 1 = V / (3\pi^2) k_F^3$ aus.
- Berechnen Sie die Energie $E^{(0)}$ im Grundzustand. Drücken Sie Ihr Ergebnis zunächst durch die Fermie-Energie ε_F und Teilchenanzahl N aus. Schreiben Sie dann das Ergebnis als Funktion des Dichteparameters r_s in Einheiten der Rydberg-Energie $R_y = e^2 / (8\pi\epsilon_0 a_B)$ auf.
- Jetzt wollen wir $E^{(1)}$ berechnen. Zeigen Sie dazu zunächst, dass sich für $E^{(1)}$ ergibt

$$\frac{E^{(1)}}{N} = \frac{-V}{N} \frac{e^2}{\epsilon_0 (2\pi)^6} \int d^3q \frac{1}{q^2} S(q) \quad \text{mit} \quad S(q) = \int d^3x \Theta(k_F - |\vec{x} - \frac{1}{2}\vec{q}|) \Theta(k_F - |\vec{x} + \frac{1}{2}\vec{q}|),$$

indem Sie die Substitution $\vec{x} = \vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}$ benutzen und die Relativkoordinate $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ einführen. $\Theta(x)$ ist die Sprungfunktion.

- Machen Sie sich klar, dass die Integration von $S(q)$ über die Kugelkappe geht mit

$$S(q) = 2\theta(k_F - \frac{1}{2}q) \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\frac{q/2}{k_F}}^1 d \cos(\vartheta) \int_{\frac{q/2}{\cos \vartheta}}^{k_F} dx x^2$$

und berechnen Sie $S(q)$.

- Jetzt können wir $E^{(1)}$ ausrechnen. Damit folgt für die Gesamtgrundzustandsenergie

$$E_{HF} = E^{(0)} + E^{(1)} = \left(\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right) N R_y$$

- Berechnen Sie das Minimum von E_{HF} bezüglich des Dichteparameters r_s .