

Aufgabe 7: Dielektrische Funktion des Elektronengases

(4 Punkte)

Die dielektrische Funktion des dreidimensionalen Elektronengases hat im Rahmen der RPA Näherung für $T = 0$ die Form

$$\varepsilon(\vec{q}) = 1 - \frac{e^2}{\varepsilon_0 \Omega} \frac{2}{q^2} \sum_{\substack{\vec{k} \\ |\vec{k}| \leq k_F}} \left(\frac{1}{E(\vec{k}) - E(\vec{k} + \vec{q}) + \hbar\omega} + \frac{1}{E(\vec{k}) - E(\vec{k} + \vec{q}) - \hbar\omega} \right).$$

Wir betrachten hier den statischen Grenzfall $\omega = 0$.

- a) Berechnen Sie $\varepsilon(\vec{q}, 0)$. Ersetzen Sie dazu die Summe über \vec{k} durch ein Integral.
- b) Untersuchen Sie den Grenzfall $q \rightarrow 0$. Berücksichtigen Sie dabei die Terme einschließlich der Ordnung $\frac{1}{q^2}$. Berechnen Sie in diesem Grenzfall das abgeschirmte Potential

$$\tilde{V}_{sc}(\vec{q}) = \frac{\tilde{V}_{el}(\vec{q})}{\varepsilon(\vec{q})} \quad \text{mit} \quad \tilde{V}_{el}(\vec{q}) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 \Omega} \frac{1}{q^2}.$$

Bestimmen Sie aus $\tilde{V}_{sc}(\vec{q})$ das abgeschirmte Potential $V_{sc}(\vec{r})$ im Ortsraum.

- c) Wie verhält sich $\varepsilon(\vec{q}, 0)$ für $q \rightarrow \infty$?
- d) Skizzieren Sie $\varepsilon(\vec{q}, 0)$.

Hinweis:

$$\int x \ln \left| \frac{ax + b}{ax - b} \right| = \frac{b}{a} x + \frac{1}{2} \left(x^2 - \frac{b^2}{a^2} \right) \ln \left| \frac{ax + b}{ax - b} \right|.$$

Aufgabe 8: Plasmonpolariton

(3 Punkte)

Sie haben in der Vorlesung bzw. in Aufgabe 4 die Bedingungsgleichungen für elektromagnetische Wellen im Volumenkristall und an einer Oberfläche kennengelernt. Wenden Sie diese jetzt an, um Plasmonpolaritonen zu behandeln. Gehen Sie dabei von einer dielektrischen Funktion

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

aus. Dabei ist ω_p die Plasmonfrequenz im Volumenkristall.

- a) Bestimmen Sie die Frequenzen $\omega(\vec{k})$ der longitudinalen und der transversalen Wellen im Volumenkristall.
- b) Berechnen Sie jetzt die Frequenzen der Wellen mit $\text{rot } \vec{E} \neq 0$ an einer Oberfläche.
- c) Skizzieren Sie die berechneten Frequenzen in Abhängigkeit von $|\vec{k}|$.
- d) Lassen sich die Oberflächenplasmonen in Luft durch Licht anregen?

Aufgabe 9: Hartree-Fock-Näherung**(3 Punkte)**

Der Hamiltonoperator eines Systems wechselwirkender Elektronen in einem Potential $V(\vec{r})$ hat die Form

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + V(\vec{r}_j) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq j'} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}|} .$$

Im Rahmen der Besetzungszahldarstellung unter Verwendung der Basisfunktion $\psi_l(\vec{r}, \vec{s}) = \psi_l(\vec{x})$ hat der Hamiltonoperator die Form

$$\hat{H} = \sum_{i,l} A_{il} \hat{c}_i^+ \hat{c}_l + \sum_{i,j,l,m} \frac{1}{2} B_{ijlm} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_l \hat{c}_m .$$

- a) Geben Sie A_{ij} und B_{ijlm} in Form von Integralen an. Welcher Zusammenhang besteht zwischen B_{ijlm} und B_{jiml} ?
- b) Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung wird \hat{H} durch einen effektiven Hamiltonoperator approximiert

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_{\text{HF}} + W \quad \text{mit} \quad \hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{i,l} D_{il} \hat{c}_i^+ \hat{c}_l .$$

Der Term W enthält keine Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Die Approximation wird durch folgende Ersetzung des Viereroperators realisiert:

$$\begin{aligned} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_l \hat{c}_m &\approx \hat{c}_i^+ c_m \langle \hat{c}_j^+ c_l \rangle_0 + \hat{c}_j^+ \hat{c}_l \langle \hat{c}_i^+ \hat{c}_m \rangle_0 \\ &\quad - \langle \hat{c}_i^+ \hat{c}_m \rangle_0 \langle \hat{c}_j^+ \hat{c}_l \rangle_0 \\ &\quad - \hat{c}_i^+ \hat{c}_l \langle \hat{c}_j^+ c_m \rangle_0 - \hat{c}_j^+ \hat{c}_m \langle \hat{c}_i^+ \hat{c}_l \rangle_0 \\ &\quad + \langle \hat{c}_i^+ \hat{c}_l \rangle_0 \langle \hat{c}_j^+ \hat{c}_m \rangle_0 . \end{aligned}$$

Die Erwartungswerte $\langle \rangle_0$ werden bezüglich der Eigenfunktionen des effektiven Hamiltonoperators gebildet. Es gilt:

$$\langle \hat{c}_i^+ c_m \rangle_0 = n_m \cdot \delta_{i,m} .$$

- i) Berechnen Sie D_{il} und W . Stellen Sie Ihr Ergebnis mit Hilfe von A_{il} , B_{ijjl} , B_{ijlj} und n_j dar.
Hinweis: Substituieren Sie die Summationsvariablen in geeigneter Weise.
- ii) Die Koeffizienten D_{il} des Operators \hat{H}_{HF} lassen sich in der Form

$$D_{il} = \int \psi_i^*(\vec{x}) \hat{O}(\vec{r}) \psi_l(\vec{x}) d^3x$$

schreiben. Die Funktionen $\psi_l(\vec{x})$ werden so gewählt, dass sie Eigenfunktionen von \hat{O} sind

$$\hat{O} \psi_l(\hat{x}) = \lambda_l \psi_l(\vec{x}) .$$

Damit gilt

$$D_{il} = \lambda_l \delta_{i,l} .$$

Vergleichen Sie diese Eigenwertgleichung mit der aus dem letzten Semester bekannten Form der Hartree-Fock-Gleichung in der Orts-Spin-Darstellung.