3. Übung zur Festkörpertheorie II (SS 2014) **Prof. Krüger**

Ausgabedatum: 15.05.2014 Abgabedatum: 22.05.2014

Aufgabe 7: Hartree-Fock-Näherung (3 Punkte)

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

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2\,m} + V(\vec{r}_j) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq j'} \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_j - \vec{r}_{j}|} \; .$$

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

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

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

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

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 $\hat{H}_{\text{HF}}$ lassen sich in der Form

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

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

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

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.

Aufgabe 8: Bogoliubov-Transformation (4 Punkte)

Der Hamiltonoperator von zwei wechselwirkenden Elektronen habe die Form

$$\hat{H} \,=\, A\,(\hat{c}_1^+\,\hat{c}_1 \,+\, \hat{c}_2^+\,\hat{c}_2) \,-\, B\,(\hat{c}_1^+\,\hat{c}_2^+ \,+\, \hat{c}_2\,\hat{c}_1)$$

mit den Konstanten $A,\, B \,>\, 0$.

Durch Übergang zu neuen Operatoren $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{\alpha}^+$ und $\hat{\beta}^+$ mit

$$\hat{c}_1 \,=\, u\,\hat{\alpha} + v\,\hat{\beta}^+\,, \quad \hat{c}_1^+ \,=\, u\,\hat{\alpha}^+ + v\,\hat{\beta}\,, \quad \hat{c}_2 \,=\, u\,\hat{\beta} - v\,\hat{\alpha}^+\,, \quad \hat{c}_2^+ \,=\, u\,\hat{\beta}^+ - v\,\hat{\alpha}$$

lässt sich $\hat{H}$ auf „Diagonalform" bringen. Dabei sind u und v reelle Konstanten.

a) Berechnen Sie für den Fall $u^2 \,+\, v^2 \,=\, 1$ die Antikommutatoren

$$[\hat{\alpha},\, \hat{\alpha}^+]_+\;, \qquad [\hat{\alpha},\, \hat{\beta}^+]_+ \qquad \text{und} \qquad [\hat{\beta},\, \hat{\beta}^+]_+\;.$$

b) Setzen Sie die obige Transformation in den Hamiltonoperator ein und zeigen Sie, dass sich $\hat{H}$ in die Form

$$\hat{H} \,=\, F\,(\hat{\alpha}^+\,\hat{\alpha} \,+\, \hat{\beta}^+\,\hat{\beta}) \,+\, G$$

bringen lässt. Dabei sind F und G Konstanten. Wie sind dabei, unter der Nebenbedingung $u^2 \,+\, v^2 \,=\, 1$, die Konstanten u und v zu wählen?

c) Geben Sie die Grundzustandsenergie des Systems an.

Aufgabe 9: Lorentz-Oszillator (3 Punkte)

In einem klassischen Modell für die Abschirmung in einem Festkörper nehmen wir an, dass ein äußeres Feld

$$\vec{E}\,(t) \,=\, \vec{E}_0 \,\cdot\, \mathrm{e}^{-i\,\omega\,t}$$

die Elektronen im Festkörper um $\vec{r}\,(t)$ verschiebt. Dabei wirken neben dem Feld $\vec{E}$ auch die „Rückstellkraft" $-m\,\omega_0^2\,\vec{r}\,(t)$ und die Reibungskraft $-2\,m\,\gamma\,\dot{\vec{r}}\,(t)$ auf das Elektron. Die Verschiebung bewirkt ein Dipolmoment, das zur einer Polarisation $\vec{P} \,=\, -e \cdot n\,\vec{r}\,(t)$ führt. Dabei ist n die Dichte der Elektronen.

a) Stellen Sie die Newton'sche Bewegungsgleichung auf und lösen Sie diese.

b) Berechnen Sie aus

$$\varepsilon_0\,\varepsilon\,(\omega)\,\vec{E}\,(\omega) \,=\, \varepsilon_0\,\vec{E}\,(\omega) \,+\, \vec{P}\,(\omega)$$

die dielektrische Funktion.

Geben Sie Ihr Ergebnis unter Verwendung der Plasmafrequenz

$$\omega_p^2 \,=\, \frac{e^2}{\varepsilon_0}\,\frac{n}{m}$$

an.

c) Zerlegen Sie $\varepsilon\,(\omega)$ in den Realteil $\varepsilon_1\,(\omega)$ und den Imaginärteil $\varepsilon_2\,(\omega)$ und skizzieren Sie diese als Funktionen von ω.