2. Übung zur Festkörpertheorie II (SS 2015) **Prof. Krüger**

Ausgabedatum: 28.04.2015 Abgabedatum: 05.05.2015

Aufgabe 5: 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) 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

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

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 6: Dielektrische Funktion des Elektronengases (4 Punkte)

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

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

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) Betrachten Sie den Fall $q \ll 2k_F$. Berücksichtigen Sie dabei die Terme einschließlich der Ordnung $\frac{1}{q^2}$. Berechnen Sie in diesem Grenzfall das abgeschirmte Potential

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

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

c) Wie verhält sich $\varepsilon(\vec{q}, 0)$ für $q \to \infty$?

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 7: Lorentz-Oszillator (3 Punkte)

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

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

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 $-2m\gamma\dot{\vec{r}}(t)$ 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.