

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2018/2019

PROF. DR. A. SHNIRMAN
PD DR. B. NAROZHNY, M.SC. T. LUDWIG

Blatt 9
Besprechung 19.01.2017

1. Hartree-Fock Näherung als Variationsproblem: (50 Punkte)

Wir betrachten $2N$ wechselwirkende Elektronen im Potential $U^{(1)}(r)$, dass von Ionen (z.B. in einer Molekül oder in Metall) erzeugt ist. Der Hamilton-Operator lautet

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d^3r \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(r) \Delta \hat{\Psi}_{\sigma}(r) + \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(r) U^{(1)}(r) \hat{\Psi}_{\sigma}(r) \right\} + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{1}{2} \int \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\Psi}_{\sigma_1}^{\dagger}(r_1) \hat{\Psi}_{\sigma_2}^{\dagger}(r_2) U^{(2)}(r_1 - r_2) \hat{\Psi}_{\sigma_2}(r_2) \hat{\Psi}_{\sigma_1}(r_1) .$$

Die Coulombabstoßung ist gegeben durch $U^{(2)}(r_1 - r_2) = e^2/|r_1 - r_2|$.

- (a) (15 Punkte) Als Variationsansatz für die Mehrteilchenwellenfunktion Φ nehmen wir die Slater-Determinante konstruiert aus N unbekanntenen 1-Teilchen-Wellenfunktionen (Orbitalen) $\varphi_n(r)$ ($n = 1, \dots, N$). Jedes Orbital taucht zweimal in Φ auf: einmal mit Spin rauf und einmal mit Spin runter. Berechnen Sie den Erwartungswert der Energie $E[\Phi] \equiv \langle \Phi | H | \Phi \rangle$. Benutzen Sie die Methode der zweiten Quantisierung.
Hinweis: Die Feldoperatoren $\hat{\Psi}_{\sigma}(r)$ lassen sich in jeder vollständigen 1-Teilchen-Basis entwickeln, z.B., $\hat{\Psi}(x) = \sum_n \varphi_n(x) \hat{c}_n$ (die Spin-Indizes sowohl in der Koordinate x als auch in der Quantenzahl n enthalten.). Hier \hat{c}_n ist der Vernichtungsoperator.
- (b) (10 Punkte) Im Variationsverfahren minimieren wir die Energie $E[\Phi]$ unter Voraussetzung, dass die Orbitale $\varphi_n(r)$ normiert sind. Dafür brauchen wir die Lagrange-Multiplikatoren \mathcal{E}_n . Das relevante Funktional lautet

$$\tilde{E}[\Phi] = \langle \Phi | H | \Phi \rangle - \sum_{n=1}^N \mathcal{E}_n \langle \phi_n | \phi_n \rangle .$$

Variieren Sie dieses Funktional und leiten Sie die folgenden Hartree-Fock-Gleichungen für die Orbitale $\varphi_n(r)$ her:

$$\mathcal{E}_n \phi_{n,\sigma}(r) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U^{(1)}(r) \right\} \phi_{n,\sigma}(r) + \sum_{n_1, \sigma_1} \int \int d^3r_1 \phi_{n_1, \sigma_1}^*(r_1) U^{(2)}(r_1 - r) \phi_{n,\sigma}(r) \phi_{n_1, \sigma_1}(r_1) - \sum_{n_1} \int \int d^3r_1 \phi_{n_1, \sigma}^*(r_1) U^{(2)}(r_1 - r) \phi_{n,\sigma}(r_1) \phi_{n_1, \sigma}(r) .$$

Beobachten Sie, dass \mathcal{E}_n die Rolle der Einteilchen-Energie übernimmt.

- (c) (25 Punkte) Betrachten Sie jetzt das Jellium-Modell eines Metalls, sodass $U^{(1)}(r) = -\int d^3r_1 n_i(r_1) \frac{e^2}{|r-r_1|}$. Hier ist n_i die Dichte der Ionen (n_i ist r -unabhängig innerhalb des Volumens V). Zeigen Sie, dass der Hartree-Beitrag und der $U^{(1)}$ -Beitrag sich gegenseitig kürzen, wenn die Elektron-Dichte n_e gleich der Ion-Dichte ist, $n_e = n_i$. Zeigen Sie, dass die ebene Wellen $\varphi_p(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp[i\vec{p}\vec{r}]$ eine Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen für das Jellium-Modell ergeben. Berechnen Sie die Energie \mathcal{E}_p (inklusive Fock-Energie) angenommen alle Zustände mit $|\vec{p}| < p_F$ besetzt sind und alle anderen sind leer.

2. Hartree-Fock Näherung in Graphen:

(50 Punkte)

Wir wiederholen die obere Aufgabe für den Fall des Graphens. Eine Besonderheit dabei ist es, dass zusätzlich zu den Ort- und Spin-Koordinaten, eine Subgitter-Koordinate $\alpha = A, B$ nötig ist. Dann ist der Feldoperator ein 2-Spinor im A, B -Raum, $\hat{\Psi}_{\alpha,\sigma}(r)$. Der Hamilton-Operator lautet

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\sigma,\alpha,\beta} \int d^2r \left\{ \hat{\Psi}_{\alpha,\sigma}^\dagger(r) h_{\alpha,\beta} \hat{\Psi}_{\beta,\sigma}(r) + \hat{\Psi}_{\alpha,\sigma}^\dagger(r) U^{(1)}(r) \delta_{\alpha,\beta} \hat{\Psi}_{\beta,\sigma}(r) \right\} \\ &+ \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\alpha_1,\alpha_2} \frac{1}{2} \int \int d^2r_1 d^2r_2 \hat{\Psi}_{\alpha_1,\sigma_1}^\dagger(r_1) \hat{\Psi}_{\alpha_2,\sigma_2}^\dagger(r_2) \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \hat{\Psi}_{\alpha_2,\sigma_2}(r_2) \hat{\Psi}_{\alpha_1,\sigma_1}(r_1) . \end{aligned}$$

Das Potential $U^{(1)}(r)$ ist wieder das Jellium-Potential von Ionen.

Die 2×2 Matrix $h_{\alpha,\beta}$ ist der Hamilton-Operator in Graphen in der Nähe des Dirac-Punktes:

$$\hat{h} = v \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix} .$$

Dieses Verhalten ist korrekt für Impulse $|\mathbf{p}| < \Lambda$, wobei Λ ein cut-off Impuls ist. Das Energie-Spektrum ist dann linear $E_{\mathbf{p}} = \pm v|\mathbf{p}|$. Einfachheitshalber betrachten wir nur ein Tal (Valley).

- (a) (10 Punkte) Leiten Sie die Hartree-Fock-Gleichungen her.

- (b) (20 Punkte) Zeigen Sie, dass die Eigenzustände des Operators \hat{h} eine Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen ergeben.

Benutzen Sie die folgende Darstellung:

$$\hat{h} = vp \begin{pmatrix} 0 & e^{i\varphi_{\mathbf{p}}} \\ e^{-i\varphi_{\mathbf{p}}} & 0 \end{pmatrix} ,$$

wobei

$$\cos \varphi_{\mathbf{p}} = \frac{p_x}{p}, \quad \sin \varphi_{\mathbf{p}} = \frac{p_y}{p}, \quad p \equiv |\mathbf{p}| .$$

- (c) (20 Punkte) Nehmen Sie an, dass das untere Band besetzt wobei das obere band leer ist. Zeigen Sie, dass sich die folgende elektronische Energie mit der Fock-Korrektur ergibt

$$\mathcal{E}_p = \pm v(p)|\mathbf{p}|, \quad v(p) = v \left(1 + \frac{e^2}{4\hbar v} \ln \frac{\Lambda}{|\mathbf{p}|} \right) .$$