

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  $\Phi$  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  $\Phi$  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  $2 \times 2$  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  $\Lambda$  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

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