

Jellium Modell (Fortsetzung)

Wdh: klassischer Hamiltonian des Jellium Modells

$$\| H_c = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} V_q (V^2 p_{e,q} p_{e,q} - e^2 N) \|$$

Übergang zur Quantenfeldtheorie

$$p_{e,q} \rightarrow \hat{p}_{e,q} \quad N \rightarrow \hat{N}$$

Erhöhen der Operatoren

Ziel: $H_c = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} V_q (V^2 \hat{p}_{e,q} \hat{p}_{e,q} - e^2 \hat{N})$

$\hat{p}_{e,q}$:

$$\hat{p}_e(x) = -e \hat{n}(x) = -e \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x)$$

Heisenberg operieren mit Spin

$$\hat{p}_{e,q} = \int dx e^{iq \cdot x} \hat{p}_e(x) = -e \int dx e^{iq \cdot x} \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x)$$

\hat{N} :

$$\hat{N} = \int \hat{n}(x) d^3r = \int d^3r \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x)$$

$$\psi_s(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k a_{k,s} e^{ik \cdot x}$$

$$p_{e,q} = -e \sum_{k,s} \frac{1}{V} \int dx e^{iq \cdot x} a_{k,s}^\dagger a_{k,s} e^{i(k-k) \cdot x}$$

$$p_{e,q} = -\frac{e}{V} \sum_{k,s} a_{k+q,s}^\dagger a_{k,s}$$

einsetzen in H_c :

$$H_c = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q \neq 0 \\ s, s'}} V_q a_{k+q, s}^+ a_{k, s} a_{k', s'}^+ a_{k', s'} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q \neq 0 \\ s, s'}} \cancel{V_q a_{k, s}^+ a_{k', s'} a_{k', s} a_{k, s}}$$

$$V_q = e^2 W_q \quad \parallel \text{Vorsatz: } V_q = \frac{e^2}{\epsilon_0 V} \frac{1}{q^2} \parallel \bar{u}$$

$$a_{k+q, s}^+ a_{k, s} a_{k'-q, s'}^+ a_{k', s'} = \delta_{s, s'} \delta_{k, k'} a_{k+q, s}^+ a_{k', s'} \quad (i)$$

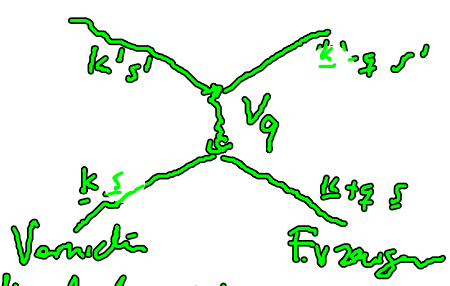
$$- a_{k+q, s}^+ a_{k'-q, s'}^+ a_{k, s} a_{k', s'} \quad (ii)$$

$$\parallel H_c = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k' \\ q \neq 0 \\ s, s'}} V_q a_{k+q, s}^+ a_{k'-q, s'}^+ a_{k, s} a_{k', s'} \parallel$$

$$\parallel H_0 = \sum_{k, s} \epsilon_{k, s} a_{k, s}^+ a_{k, s} \parallel$$

$\parallel H = H_0 + H_c \parallel$ Elektron Spin Hamilton Operator

Interpretation:



Führt die Wechselwirkung zu Elektronen Erzeugern?
 Kann die metallische Bindung erklären werden?

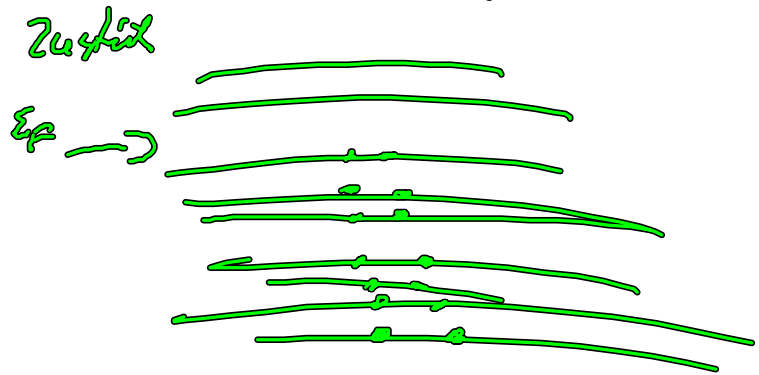
Wir müssen die Energie des Grundzustands berechnen! (für freien Elektronen z.B. Atomelemente)

Im Prinzip: $H = \underbrace{H_0}_{\text{freier Anteil}} + \underbrace{H_{\text{coul}}}_{\text{Störung}}$ (keine Störung bei geringen Elektronendichte!)

Lösungsbasis

Wir suchen Eigenzustand zu H_0 und zum Grundzustand!

Pauli Prinzip, jeder Zustand kann nur einmal besetzt werden!



bis Fermi Energie ϵ_F sind alle Zustände besetzt.
(Zustände von unten nach oben (bzw. Energie))

$$|0\rangle_g = \prod_{\substack{k < k_F \\ s}} a_{k,s}^\dagger |0\rangle_{\text{Vakuum}}$$

Energie der Wechselwirkung (kinetischer Anteil):

$$\begin{aligned} \langle 0 | H_0 | 0 \rangle_g &= \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} \langle 0 | a_{k,s}^\dagger a_{k,s} | 0 \rangle_g \\ &= \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} n_{k,s} = \sum_{k,s} \theta(\epsilon_F - \epsilon_{k,s}) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|k| < k_F} d^3k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 4\pi \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk \frac{\hbar^2 k^2}{2m} k^2 \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^5}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \end{aligned}$$

$$\langle 0 | H_0 | 0 \rangle_g = \frac{\hbar^2 V}{10m\pi^2} (3\pi^2 n)^{\frac{5}{3}}$$

kinetischer Anteil

k_F Fermi
 $N = 2 \sum_{k \leq k_F} 1 = \frac{8\pi}{(2\pi)^3} V \frac{1}{3} k_F^3$
 $\Rightarrow k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \left| \quad \frac{N}{V} = n \right.$
 Elektronendichte

Beitrag der Coulomb-Anteil in 1. Ordnung Störungstheorie (Hartree-Fock Level)

Die Korrektur in 1. Ord. Störungstheorie ist:

$$\begin{aligned} \langle 0 | H_c | 0 \rangle_g &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{q \neq 0 \\ k, k', s, s'}} V_q \langle 0 | a_{k+s, s}^\dagger a_{k'-q, s'}^\dagger a_{k', s'} a_{k, s} | 0 \rangle_g \\ &\quad \xrightarrow{\text{anordnen}} \Rightarrow \theta(\epsilon_F - \epsilon_q) \theta(\epsilon_F - \epsilon_{k'}) \\ &\quad \xrightarrow{\text{anordnen}} \langle 0 | a_{k+s, s}^\dagger a_{k'-q, s'}^\dagger a_{k', s'} a_{k, s} | 0 \rangle_g \\ &= - \langle 0 | a_{k+s, s}^\dagger a_{k', s'} (-a_{k, s} a_{k'-q, s'}^\dagger + \delta_{k, k'} \delta_{s, s'}) | 0 \rangle_g \end{aligned}$$

Bemerkung $a_{k+q, s}^+ |0\rangle_s = 0$ für $|k+q| \leq k_F$
 da schon besetzt

$$= - \langle 0 | \sum_{\substack{q \neq 0 \\ \leq, \leq s}} a_{k+q, s}^+ a_{k+q, s} |0\rangle_s \delta_{k, k+q} \delta_{s, s}$$

1 für $|k+q| \leq k_F!$ gleich Spat!

Austauschen der QM

$$\langle 0 | \sum_{\substack{q \neq 0 \\ \leq, \leq s}} V_q \delta_{k, k+q, s} \theta(\xi_F - \xi_k) \theta(\xi_F - \xi_{k+q})$$

Dieses Integral wird gelöst

side; Hecke Kod

lassend sieht es:

$$= \frac{e^2 V}{(4\pi)^2 4\pi^3 \epsilon_0} (3\pi^2 n)^{\frac{4}{3}}$$

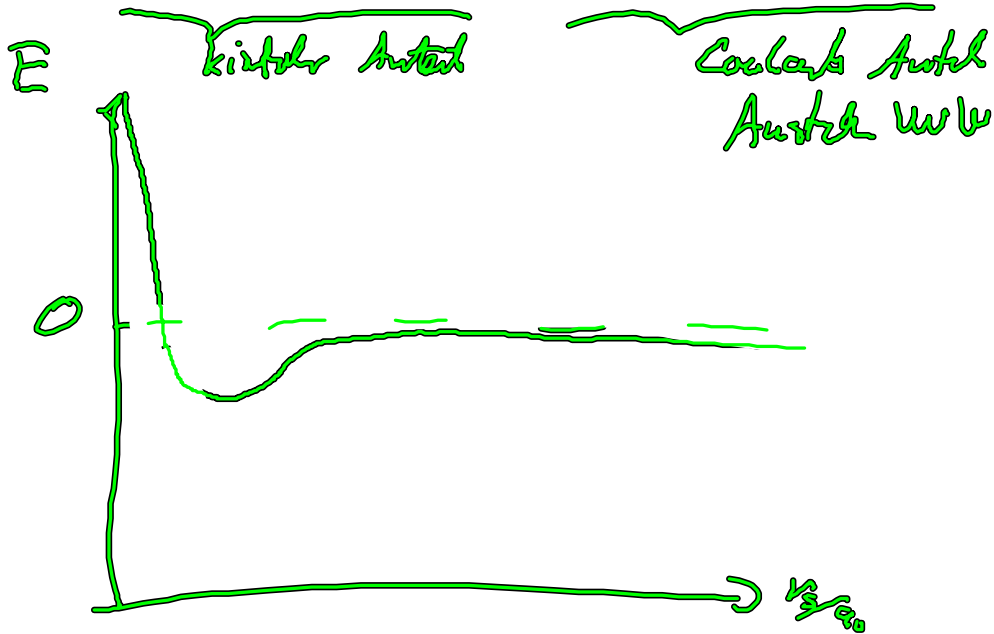
$$\langle 0 | H | 0 \rangle = \frac{1}{2} \frac{e^2 V}{\pi^2 \pi} (3\pi^2 n)^{\frac{5}{3}} - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} (3\pi^2 n)^{\frac{4}{3}}$$

Das kann umformuliert werden mit dem Wigner-Seitz Radius
 Radius eines Kugel die ein Teilchen umschließt.

$$\| r_s^{-3} = \frac{4\pi}{3} n a_0^3 \| \text{ in Einheiten des Bohr'schen Radius}$$

Die Formel kann man jetzt einsetzen (Plus, Elektron, Exzitons in Solids)

$$E_{gr} = \frac{2,21}{r_s^2} \text{ rydberg} - \frac{0,916}{r_s} \text{ rydberg}$$



(i) Energie < 0 bindender Zustand

(ii) Es existiert ein optimales Elektronendichte

⇒ Phänomene der metallischen Bindung! wird qualitativ durch die Abwesenheit der Austausch WW beschrieben.

Problem: Reduzierung nur sehr Abschwächen auf Hartree-Fock Level.

Anderes Taler mit gleicher Spalte kann sich hier beliebig nahe (führt die Coulomb Abstoßung)

⇒ Nicht Stütz Korrelationsenergie.

VII.2 Coulomb's Hamiltonoperator

Die klassische Coulomb Wechselwirkung, Anteil Hamiltonian falls:

$$H_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \int dx \int dx' \rho(x,t) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|x-x'|} \rho(x',t) d^3x d^3x'$$

Elektronendichte

$$\rho(x,t) = \psi^*(x,t) \psi(x,t)$$

$$= \frac{1}{2} \int dx \int dx' \psi^*(x,t) \psi(x,t) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |x-x'|} \psi^*(x',t) \psi(x',t) d^3x d^3x'$$

Übung in 2. Ordnung, Problem die Ordnung der Faktoren ist nicht ausgezeichnet!

Wir wählen die Ordnung der Operatoren so dass keine Energie im Vakuum, sowie in Fürtalthezuständen durch Coulomb WW auftritt.

$$H_{\text{Coul}} = \sum_{SS'} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \psi_S^\dagger(\mathbf{x}) \psi_{S'}^\dagger(\mathbf{x}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \psi_S(\mathbf{x}) \psi_{S'}(\mathbf{x}')$$

Reihenfolge durch Vorzeichen in den Schrodinger-Gleichungen!

Ziel: Ausdruck für Coulomb Wechselwirkung der Blochfunktion

Erweiterung an Blochfunktion

$$\psi_{\mathbf{k},k}(\mathbf{x}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\sqrt{V}} u_{\mathbf{k},k}(\mathbf{x})$$

Aus gibt es: $\psi_S^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k},k}^\dagger(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k}}^\dagger$

- Einsetzen:

$$H_{\text{Coul}} = \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \\ k_1, k_2, k_3, k_4}} V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1, k_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, k_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3, k_3} a_{\mathbf{k}_4, k_4}$$

$$V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} = \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 \psi_{\mathbf{k}_1, k_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}_2, k_2}^\dagger(\mathbf{x}_2) \frac{1}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} e^{-i(\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{x}_2)} \psi_{\mathbf{k}_3, k_3}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}_4, k_4}(\mathbf{x}_2)$$

$$= \dots = \frac{e^2}{V \epsilon_0 (|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|^2 + \kappa^2)} \underbrace{\int_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3} \int_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}}_{\text{Sittich } \delta\text{-Spiz}}$$

1) Coulomb WW in dieser Näherung ändert nicht das Band.

2) Quasi Impuls wird erhalten.

3) Sieht Coulomb WW im 2teil Modell sehr ähnlich!