Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik

18. Mai 2007

Prof. Dr. A. Knorr
Dipl.-Phys. Frank Milde,
Dipl.-Phys. Marten Richter

www.itp.tu-berlin.de/tfp07.html

5. Übungsblatt zur Theoretischen Festkörperphysik

Abgabe: bis Dienstag 29.05.2007 10:15 Uhr in der Vorlesung.

Aufgabe 7 (15 Punkte): *Hartree-Fock im effektiven Hamiltonian*
Wir haben ein System wechselwirkender Fermionen mit ihren Erzeugern und Vernichtern $a_1^\dagger$ und a_2. Der dieses System beschreibende Hamilton inklusive Coulomb Wechselwirkung ist:

$$H = \sum_{33'} h_{33'} a_3^\dagger a_{3'} + \frac{1}{2} \sum_{33'44'} V_{34,3',4'} a_3^\dagger a_4^\dagger a_{4'} a_{3'}. \tag{1}$$

Hier bei seien $a_3^\dagger$ und a_3 Erzeuger und Vernichtern zu einer Basis von Funktionen $\psi_n(r)\chi_{s_n}$. Die Matrixelemente $h_{33'}$ gehören zum folgenden Einteilchenteil des Hamiltonoperatores für ein Teilchen am Ort r: $h = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_G(r)$. $V_{343'4'}$ stellen die Matrixelemente zur Coulombwechselwirkung $\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|r-r'|}$ für zwei Teilchen am Ort r bzw. am Ort r' dar:
(1) Stellen Sie die Bewegungsgleichung für $\langle a_1^\dagger a_2 \rangle$ im Heisenbergbild auf mit Hilfe der Heisenbergbewegungsgleichung.
(2) Wenden Sie die Hartree-Fockfaktorisierung auf die Bewegungsgleichung an.
(3) Welche Form müßte $V_{33'}$ haben, wenn das System durch einen effektiven Hamiltonnian der Form:

$$\tilde{H}(t) = \sum_{33'} h_{33'} a_3^\dagger a_{3'} + \sum_{33'} V_{33'}(t) a_3^\dagger a_{3'} \tag{2}$$

beschrieben würde?
(4) Stellen Sie das Matrixelement $h_{33'}$ und das Matrixelement $V_{34,3',4'}$ in den beliebigen Basisfunktionen $\psi_n(r)\chi_{s_n}$ im Ortraum und Spinraum dar (Herleitung!).
(5) Tun sie das Gleiche wie in Teilaufgabe (4) für die Hartree-Focknäherung in Gl. 2 also (für $V_{33'}$), Sie sollten folgendes als Ergebnis erzielen:

$$\begin{aligned} V_{ns_n n's_{n'}}(t) =& \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{mm's_m s_{m'}} \int d^3r \int d^3r' \frac{\psi_{n'}^*(r)\psi_n(r)\psi_{m'}^*(r')\psi_m(r')}{|r-r'|} \delta_{s_{n'}s_n} \delta_{s_{m'}s_m} \langle a_{ms_m}^\dagger a_{m's_{m'}} \rangle(t) \\ &- \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{mm's_m s_{m'}} \int d^3r \int d^3r' \frac{\psi_n^*(r)\psi_{n'}(r')\psi_m^*(r')\psi_{m'}(r)}{|r-r'|} \delta_{s_{n'}s_m} \delta_{s_{m'}s_n} \langle a_{ms_m}^\dagger a_{m's_{m'}} \rangle(t) \end{aligned} \tag{3}$$

(5) Wenden Sie $\langle a_{ms_m}^\dagger a_{m's_{m'}} \rangle = f_m^{s_m} \delta_{s_m s_{m'}} \delta_{mm'}$ an und leiten Sie die Hartree-Fockgleichungen für $\psi_n(r)$ her. Aus denen durch iteratives Einsetzen die elektronischen Wellenfunktionen bestimmt werden können.