5. Übung zur Einführung in die Festkörpertheorie (WS 2013/14) **Prof. Krüger**

Ausgabedatum: 14.01.2014 Abgabedatum: 21.01.2014

Aufgabe 14: Gitterschwingungen in einer linearen Kette (5 Punkte)

Gegeben sei eine lineare Kette mit zwei Atomen der Massen M_1 und M_2 pro Elementarzelle. Die Atome befinden sich an den Positionen

$$X_{j,\nu} = R_j + \tau_\nu + u_{j,\nu} ,$$

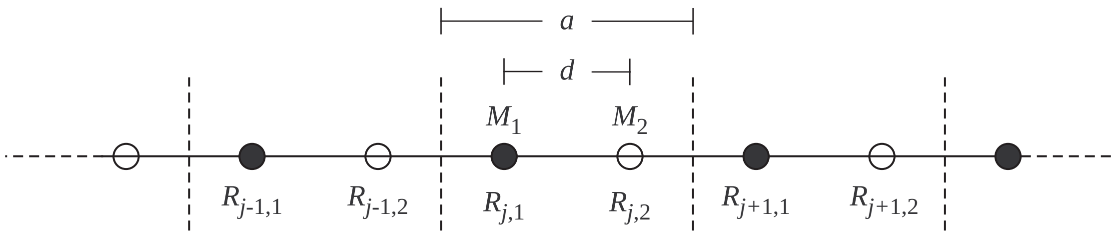
wobei der Gittervektor $R_j = j \cdot a$ und der Basisvektor τ_ν die Gleichgewichtslage beschreibt und $u_{j,\nu}$ die Auslenkung des Atoms darstellt. Je zwei benachbarte Atome wechselwirken mit einem Potential $V(x)$, welches gegeben ist durch:

$$V(x) = D\left\{ \mathrm{e}^{-2\alpha x} - 2\,\mathrm{e}^{-\alpha x} \right\} .$$

Damit ist die potentielle Energie der Kette also gegeben durch:

$$E^{el} = \sum_i \left\{ V\left((X_{i,1} - X_{i-1,2}) - d\right) + V\left((X_{i,2} - X_{i,1}) - d\right) \right\} ,$$

wobei d der Ruheabstand zweier Atome ist.



a) Skizzieren Sie das Paarpotential $V(x)$.

b) Berechnen Sie die Kraftkonstanten $\phi(j\,\nu,\, j'\,\nu')$.

c) Stellen Sie die Dynamische Matrix $D_{\nu\nu'}(q)$ auf und berechnen Sie die Eigenfrequenzen $\omega(q)$ des Systems. Was ergibt sich für $q = 0$ bzw. $q = \pm\dfrac{\pi}{a}$?

d) Betrachten Sie speziell den Fall gleicher Massen, d. h. $M_1 = M_2 = M$. Wie sehen jetzt die Eigenfrequenzen $\omega(q)$ aus?

e) Entwickeln Sie $V(x)$ bis zur 2. Ordnung in x und interpretieren Sie Ihre Ergebnisse im Lichte dieser Entwicklung.

Aufgabe 15: Homogenes Elektronengas in Hartree-Fock-Näherung (5 Punkte)

Im Rahmen des Jelliummodells betrachtet man N wechselwirkende Elektronen im Volumen Ω vor einem neutralisierenden Hintergrund einer räumlich konstanten positiven Kernladungsdichte

$$n_{\text{Kern}} = \frac{N}{\Omega} .$$

Die Behandlung dieses Systems im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung führt auf folgende Bedingungsgleichung für die Einteilchenwellenfunktion $\psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\,m} + V_{\text{EK}}(\vec{r}) + V_{\text{Coul}}(\vec{r}) \right) \psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r})$$

$$- \sum_{\sigma' = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}\,'} \delta_{\sigma,\sigma'} \frac{\mathrm{e}^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0} \int\limits_{\Omega} \frac{\psi^*_{\vec{k}',\sigma'}(\vec{r}\,')\,\psi_{k,\sigma}(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}\, d^3 r'\, \psi_{\vec{k}\,',\sigma'}(\vec{r}) = \lambda_{\vec{k},\sigma}\, \psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}) .$$

Dabei gilt:

$$V_{\text{EK}}(\vec{r}) = -\frac{N}{\Omega} \frac{\mathrm{e}^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0} \int\limits_{\Omega} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}\, d^3 r'$$

und

$$V_{\text{Coul}}(\vec{r}) = \frac{\mathrm{e}^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0} \int\limits_{\Omega} \frac{n(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}\, d^3 r'$$

mit

$$n(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \left| \psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}) \right|^2 .$$

Die Summen über $\vec{k}$ bzw. $\vec{k}\,'$ erstrecken sich über alle besetzten Zustände.

i) Zeigen Sie, dass für dieses System die Hartree-Fock-Gleichungen durch ebene Wellen der Form

$$\psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\, \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\,\vec{r}}\, \chi_\sigma$$

gelöst werden können. Für die Spinoren gilt:

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \qquad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Hinweis: Überzeugen Sie sich zunächst davon, dass sich in diesem Fall V_{EK} und V_{Coul} kompensieren.

ii) Berechnen Sie die Einteilchenenergien $\lambda_{\vec{k},\sigma}$. Wandeln Sie dazu die Summe über $\vec{k}$ in ein Integral um.

Hilfsintegral:

$$\int x \ln \left| \frac{x + a}{x - a} \right| d\,x = \frac{1}{2} \left(x^2 - a^2\right) \ln \left| \frac{x + a}{x - a} \right| + a\,x .$$

iii) Skizzieren Sie $\lambda_{\vec{k},\sigma}$ und diskutieren Sie das Verhalten bei $k = k_F$.