Aufgabe 16: Funktionalableitung **(2 Punkte)**

Berechnen Sie die Funktionalableitung $\dfrac{\delta G}{\delta y(x')}$ für folgende Funktionale $G[y]$:

a) $G[y] = y(x) + 3y^2(x)$,

b) $G[y] = \displaystyle\int \big(y(x) + 3y^2(x)\big)\, dx$,

c) $G[y] = \displaystyle\int y^3(x)\, x^2\, dx$,

d) $G[y] = \displaystyle\int \frac{y(x_1)\, y(x_2)}{|x_1 - x_2|}\, dx_1\, dx_2$.

Aufgabe 17: Fouriertransformation **(2 Punkte)**

a) Berechnen Sie die Fouriertransformierte

$$\tilde{v}(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \int_\Omega v(\vec{r})\, \mathrm{e}^{-i\vec{q}\vec{r}}\, d^3 r$$

des Yukawapotentials

$$v(r) = \frac{\mathrm{e}^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\mathrm{e}^{-\gamma r}}{r}$$

in einer Born-von Kármán-Zelle mit Volumen Ω. Ersetzen Sie dabei das Integrationsgebiet durch eine Kugel mit Radius $R \to \infty$.

b) Im Grenzfall $\gamma \to 0$ geht das Yukawapotential in das Coulombpotential über. Geben Sie die Fouriertransformierte an.

Aufgabe 18: Homogenes Elektronengas in Hartree-Fock-Näherung **(6 Punkte)**

Im Rahmen des Jelliummodells betrachtet man N wechselwirkende Elektronen im Volumen Ω vor einem neutralisierenden Hintergrund einer räumlich konstanten positiven Kernladungsdichte $n_{\text{Kern}} = \dfrac{N}{\Omega}$. Die Behandlung dieses Systems im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung führt auf folgende Bedingungsgleichung für die Einteilchenwellenfunktion $\psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r})$:

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

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

Dabei gilt:

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

und

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

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:

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

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

Aufgabe 19: Koopmans-Theorem (ohne Wertung)

Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherungen ist die Gesamtenergie von N Elektronen (inklusive der Kern-Kern-Wechselwirkung U_{KK}) durch

$$E^{\mathrm{el}}_{\mathrm{HF}}(N) = \sum_{j=1}^{N} A_j + \frac{1}{2} \sum_{j,j'=1}^{N} B_{jj'} + U_{\mathrm{KK}}$$

gegeben. Dabei gilt:

$$A_j = \int \psi^*_{\alpha_j}(\vec{r}) \left(\frac{\hat{p}^2}{2\,m} + V_{\mathrm{EK}}(\vec{r}) \right) \psi_{\alpha_j}(\vec{r})\, d^3 r ,$$

$$B_{jj'} = \frac{\mathrm{e}^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0} \iint \psi^*_{\alpha_j}(\vec{r})\, \psi^*_{\alpha_{j'}}(\vec{r}\,') \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} \left(\psi_{\alpha_j}(\vec{r})\, \psi_{\alpha_{j'}}(\vec{r}\,') - \psi_{\alpha_j}(\vec{r}\,')\, \psi_{\alpha_{j'}}(\vec{r}) \right) d^3 r\, d^3 r' .$$

Sei $E^{\mathrm{el}}(N-1, \alpha_l)$ die entsprechende Energie eines Systems, bei dem gegenüber $E^{\mathrm{el}}_{\mathrm{HF}}(N)$ ein Elektron im Zustand ψ_{α_l} fehlt. Näherungsweise seien die Einteilchenzustände ψ_{α_j} für beide Systeme gleich.

Zeigen Sie, dass in diesem Fall die Differenz der beiden Gesamtenergien gleich dem Lagrangeparameter λ_{α_l} (siehe Vorlesung) ist.

Hinweis: Stellen Sie zunächst λ_{α_l} durch A_l und B_{lj} dar.