INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. Ch. Jurecka

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK SS 1999

5. Übungsblatt

11. **Zweite Quantisierung**

    Gegeben sei ein Potential $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, das nur von der Differenz der (diskreten) Koordinaten i und j abhängt.

    (a) Stellen Sie dieses Potential in zweiter Quantisierung in Ortsraumdarstellung auf.

    (b) Transformieren Sie das zweitquantisierte Potential in den Impulsraum.

12. **Ein Wiedersehen mit Hartree-Fock**

    Ein Vielteilchensystem werde durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben (der Einfachheit halber betrachten wir spinlose Fermionen):

$$H = T + W = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c^{+}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) c^{+}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c^{+}_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}. \tag{1}$$

    Die Eigenwertgleichung dieses Operators ist nur mit geeigneten Näherungen lösbar. Die einfachste soll in der Folge behandelt werden:

    (a) Dazu soll der Zweiteilchenoperator durch einen Einteilchenoperator genähert werden. Zu diesem Zweck ersetzt man jeweils ein Produkt aus einem Erzeuger und einem Vernichter durch den Grundzustandserwartungswert dieses Produktes. Der effektive Hamiltonoperator ist die Summe über diese Terme. Stellen Sie ihn auf.

    (b) Die obige Näherung läßt sich folgendermaßen motivieren: Im Falle, daß Fluktuationen zweier Operatoren A,B zu vernachlässigen sind, (d.h. daß$A - \langle A \rangle \to 0$ bzw. $B - \langle B \rangle \to 0$) gilt (zu zeigen)

$$AB = A\langle B \rangle + B\langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle. \tag{2}$$

    (c) Berechnen Sie die Einteilchenenergien $\epsilon'(k)$ des wechselwirkenden Systems in der Nährung (a). Begründen Sie, daß diese Gleichung eine Selbstkonstistenzgleichung ist.

    (d) Nun soll wie in Aufgabe (9) das Jellium Modell betrachtet werden. Es gibt also wieder einen gleichmäßig verschmierten positiven Ladungshintergrund, die Wellenfunktionen sind ebene Wellen, das Wechselwirkungspotential ist das Coulombpotential $v(\mathbf{q}) = \frac{1}{V}\frac{4\pi}{q^2} = \frac{1}{V}\int dz \frac{1}{z} e^{i\mathbf{q}\mathbf{z}}$.

    - Geben Sie die Einteilchenenergien $\epsilon'(\mathbf{k})$ für das Jellium Modell an.
    - Zeigen Sie, daß der Term proportional zu $v(0)$ durch den positiven Ladungshintergrund kompensiert wird. Stellen Sie hierzu $v(\mathbf{q})$ als Fouriertransformierte des Coulombpotentials dar, integrieren Sie aber nicht. Setzen Sie $q = 0$.
    - Berechnen Sie den zweiten Term in ϵ'. Beachten Sie hierbei Aufgabe 9!