INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. C. Jurecka
Dipl.-Phys. F. Heidrich-Meisner

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK WS 2001/2002

2. Übungsblatt

---

4. **Hartree-Fock Theorie des Jellium Modells**

Ein einfaches Modell für einen Festkörper ist die Ersetzung des gitterperiodischen Potentials durch einen konstanten Ladungshintergrund mit Ladungsdichte $\rho_{pos} = \frac{Ne}{V}$ (Jellium-Modell). Das Gitterpotential ist damit

$$V_G = -\frac{Ne^2}{V}\int \frac{d^3r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{1}$$

die Hartree-Fock Gleichung für dieses Modell ist

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_G(r) + \sum_{k'}\int d^3r' \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\left(2|\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')|^2 - \frac{\varphi^*_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})}{\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}\right)\right]\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{2}$$

(a) Zeigen Sie, daß im Fall ebener Wellen, also $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{kr}}$, der Hartree (direkte) Term im Hartree-Fock Potential genau das Gitterpotential V_G kompensiert.

(b) Zeigen Sie außerdem, daß ebene Wellen die obige Hartree-Fock Gleichung lösen.

(c) Berechnen Sie die Eigenwerte ϵ_k.

Anleitung: Substituieren Sie zunächst im Integral geeignet. Nun sollten Sie folgende Beziehung verwenden (Fouriertransformation des Coulombpotentials):

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{V}\sum_k \frac{4\pi}{k^2}e^{i\mathbf{kz}}. \tag{3}$$

Die nun noch auftretende k-Raum Summe läßt sich durch Umwandlung in ein Integral lösen.