Universität Bielefeld **Dozent: Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster**
Theoretische Festkörperphysik **Tutor: Dr. Mykhaylo Evstigneev**
Sommersemester 2011 **Blatt 12**

Aufgabe 19: Das homogene Elektronengas in Hartree-Fock-Näherung (16 Punkte)

Manche Metalle lassen sich durch das translationsinvariante System eines homogenen Elektronengases modellieren. Dabei nimmt man an, daß die Ladungsdichte des Ionenhintergrunds gleichmäßig verschmiert ist, so daß sich die Elektronen praktisch frei durch das Material bewegen können. Diese drastische Annahme kann natürlich nur dann als einigermaßen vernünftig gelten, wenn die Elektronen der Ionenrümpfe abgeschlossene Edelgasschalen bilden, so daß die Valenzelektronen nur schwach gebunden und daher im Gitter des Festkörpers nur schwach lokalisiert sind. Demnach sollte das Modell des homogenen Elektronengases insbesondere bei den Alkalimetallen halbwegs vernüftige Ergebnisse liefern.

a) Im Modell des homogenen Elektronengases führt der Ionenhintergrund zur konstanten Ladungsdichte $\rho(\mathbf{x}) = eN/V$ und daher zu einem abstoßenden Beitrag zum 1-Teilchen-Potential

$$v_1 = \frac{e^2 N}{2V^2} \int d^3x \int d^3x' \, \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \, . \tag{1}$$

Entsprechend ergibt die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Ionenhintergrund und Elektronen einen anziehenden Beitrag

$$v_2 = -\sum_{i=1}^{N} \frac{e^2}{V} \int d^3x \, \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|} \, . \tag{2}$$

Berechnen Sie die Integrale in (1) und (2), indem Sie näherungsweise die Integrationen über das endliche Volumen V auf den gesamten dreidimensionalen Raum ausdehnen. Führen Sie ferner in den Integranden konvergenzerzeugende Faktoren $e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$ bzw. $e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}$ mit einem Kleinheitsparameter $\mu > 0$ ein und zeigen Sie

$$v = v_1 + v_2 = -2\pi \frac{e^2 N}{V\mu^2} \, . \tag{3}$$

(2 Punkte)

b) Das 2-Teilchen-Potential wird im homogenen Elektronengas durch die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen bestimmt:

$$U(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \, . \tag{4}$$

Berechnen Sie mit denselben Methoden wie im Aufgabenteil **a)** die Fourier-Koeffizienten

$$u_{\mathbf{q}} = \int d^3x \, U(\mathbf{x},\mathbf{x}') \, e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \, . \tag{5}$$

Betrachten Sie nun die Hartree-Fock-Energie des homogenen Elektronengases (siehe Aufgabe **18**). Zeigen Sie, daß das 1-Teilchen-Potential (3) gerade durch den Term $u_{\mathbf{0}}$ kompensiert wird. Beweisen Sie, daß die Hartree-Fock-Energie des homogenen Elektronengases im Limes $\mu \downarrow 0$ die folgende Gestalt annimmt:

$$E\left[\,\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\,,\,\phi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\right] = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}'} \frac{2\pi e^2}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^2} \, . \tag{6}$$

(4 Punkte)

c) Werten Sie die verbleibenden Summationen über die Wellenvektoren $\mathbf{k}$ wie folgt aus. Im thermodynamischen Limes geht das Volumen V gegen den gesamten dreidimensionalen Raum, so daß die diskreten in kontinuierliche Wellenvektoren übergehen. Sie können dann die Summen durch Integrale ersetzen gemäß

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \quad \Rightarrow \quad \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k\, f(\mathbf{k})\,. \tag{7}$$

Betrachten Sie ferner die Situation am absoluten Nullpunkt, bei dem $n_{\mathbf{k}}$ gerade der Fermiverteilung entspricht: $n_{\mathbf{k}} = \Theta(k_F - |\mathbf{k}|)$. Welcher Zusammenhang besteht zwischen der Gesamtteilchenzahl $N = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$ und dem Fermiimpuls k_F? Wie hängt die Hartree-Fock-Energie (6) vom Fermiimpuls k_F ab? Führt das abstoßende 2-Teilchen-Potential zu einer Erhöhung oder zu einer Erniedrigung der Gesamtenergie des homogenen gegenüber dem freien Elektronengas? (6 Punkte)

d) Geben Sie die Hartree-Fock-Energie pro Elektron in Abhängigkeit des Bohrradius $a_0 = \hbar^2/(me^2)$ und des Wigner-Seitz-Radius r_0 mit $4\pi r_0^3/3 = V/N$ an. Tragen Sie die Hartree-Fock-Energie pro Elektron über der dimensionslosen Länge $r_s = r_0/a_0$ auf. Berechnen Sie das Minimum der Hartree-Fock-Energie pro Elektron und vergleichen Sie Ihr theoretisches Resultat mit der experimentell bestimmten Grundzustandsenergie pro Elektron von Natrium, die $E_{\mathrm{G}} = -1.13$ eV beträgt. (4 Punkte)