

7. Übungsblatt

Theoretische Festkörperphysik I

Aufgabe 15 *Hartree-Fock Näherung für das freie Elektronengas* (8 Punkte)
Betrachten Sie das Modell aus Aufgabe 14 mit der homogenen Hintergrundladungsdichte $N e/V$:

$$V_0(\mathbf{r}) = -\frac{Ne^2}{4\pi\epsilon_0 V} \int d^3r' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

und der Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

a) Zeigen Sie, dass ein Satz aus N Einteilchen-Zuständen der Form aus Aufgabe 14 die Hartree-Fock-Gleichungen im Grenzfall $N, V \rightarrow \infty$ bei $\frac{N}{V} = \text{const}$ diagonalisiert und geben Sie die Einteilchenenergien an (**Hinweis:** Schreiben Sie im Austauschterm das Potential in seiner Fourierdarstellung aus Aufgabe 6a)).

b) Berechnen Sie explizit die Einteilchen-Energien, wenn die Niveaus mit niedrigster kinetischer Energie besetzt sind.

c) Begründen Sie kurz die Energieabsenkung.

Aufgabe 16 *Thomas-Fermi Näherung* (7 Punkte)

Hierbei handelt es sich um eine Näherung für die kinetische Energie von Vielelektronensystemen (Vorläufer der Dichtefunktionaltheorie). Sie approximiert die Einteilchenwellenfunktionen lokal als ebene Wellen und berechnet aus der Summe der kinetischen Energien der einzelnen Zustände die gesamte Energiedichte, wobei die Zustände niedrigster Energie besetzt sind.

a) Bestimmen Sie den Ausdruck für die lokale Energiedichte $E_{\text{kin}}(n(\mathbf{r}))$ in Abhängigkeit der Elektronendichte $n(\mathbf{r})$.

b) Geben Sie das Funktional $E\{n(\mathbf{r})\}$ der Gesamtenergie an, welches die kinetische Energie aus a), die Elektron-Elektron Wechselwirkung in Hartree-Näherung unter Vernachlässigung des Austauschtermes und ein äußeres Potential $V(\mathbf{r})$ enthält.

c) Leiten Sie über das Extremalprinzip für $E\{n(\mathbf{r})\}$ unter der Nebenbedingung konstanter Teilchenzahl die folgende Thomas-Fermi Gleichung her:

$$\Delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \Delta V(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{3\pi^2\epsilon_0\hbar^3} [2m(\mu - V_{\text{eff}}(\mathbf{r}))]^{3/2}$$

$V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ ist das Gesamtpotential, das auf ein Elektron wirkt und der Lagrange-Parameter μ ist das chemische Potential, welches im Grundzustand identisch mit der Fermi-Energie E_F ist. (Δ : Laplace Operator.)

Abgabe: 9. Juni 2006

WWW-Seite: <http://www.itp.physik.tu-berlin.de/lehre/TFP/>

Scheinkriterien: Einmal Vorrechnen in den Übungen und eine erfolgreiche Rücksprache. *und* 60 % der erreichbaren Punkte in den Übungsaufgaben (Abgabe in Dreiergruppen!)

Sprechstunden: Schöll: Mi 14:30 - 15:30 Uhr PN 735, Elsholz: Di. 14 - 15 Uhr PN 629