Prof. Dr. Eckehard Schöll, Dr. Kathy Lüdge
Dr. Carsten Weber

6. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 30.05.2011 bis 17:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 14 (10 Punkte): *Thomas-Fermi-Näherung*

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 $\varepsilon_{\text{kin}}(n(\mathbf{r}))$ 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:

$$\Delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \Delta V(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{3\pi^2\varepsilon_0\hbar^3}[2m(\mu - V_{\text{eff}}(\mathbf{r}))]^{3/2}.$$

$V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ 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).

Aufgabe 15 (10 Punkte): *Abschirmung*

Für das Hintergrundpotential einer homogenen positiven Ladungsverteilung gilt bei Ladungsneutralität (vgl. Aufgabe 14):

$$\Delta V_0 = \frac{e^2(2mE_{\text{F}})^{3/2}}{3\pi^2\varepsilon_0\hbar^3}$$

mit dem Laplace-Operator Δ. Betrachten Sie zusätzlich das Potential $V_{\text{Stör}}(\mathbf{r}) = -e^2/(4\pi\varepsilon_0|\mathbf{r}|)$ einer positiv geladenen Störstelle im Ursprung und setzen Sie $V = V_0 + V_{\text{Stör}}$.

(a) Berechnen Sie das effektive Potential aus der Thomas-Fermi-Gleichung (siehe Aufgabe 14), wobei Sie den Term $(E_{\text{F}} - V_{\text{eff}})^{3/2}$ in V_{eff} linearisieren und die Randbedingung $V_{\text{eff}} \to 0$ für $|\mathbf{r}| \to \infty$ verwenden.

(b) Definieren Sie aus dem Resultat von (a) eine Abschirmlänge und geben Sie deren Größe für die Dichte von freien Elektronen in Kupfer ($n = 8,5 \times 10^{22}$ cm^{-3}) explizit an.