Dr. Ermin Malic
Dr. Marten Richter
Dipl. Phys. Julia Kabuß

5. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I+II

Abgabe: Mi. 22.05.2013 vor Beginn der Vorlesung im EW 203
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte Matrikelnummer auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 7 (7 Punkte): *Coulombwechselwirkung in zweiter Quantisierung*

In dieser Aufgabe soll die Einführung der Coulombwechselwirkung als typischer Zwei-Teilchenoperator aus der VL nachvollzogen werden.
Das Matrixelement der abgeschirmten Coulombwechselwirkung lautet:

$$V_{1,2,3,4} = \langle 1| \langle 2| \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|} e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|} |3\rangle |4\rangle$$

mit den Elektronenzuständen:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \left| s_n^{(i)} \right\rangle e^{i\vec{k}_n \vec{r}} \quad \text{mit} \quad i = 1, 2.$$

Wobei $\vec{k}$ Wellenzahl- und $\vec{r}$ Ortsvektoren sind und $s_n^{(i)}$ der zugehörige Spin. Zeigen Sie, dass für ein endliches Volumen V:

$$V^{s_1,s_2,s_3,s_4}_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} = \frac{e^2}{V\varepsilon_0 \left(\left| \vec{k}_1 - \vec{k}_3 \right|^2 + \alpha^2 \right)} \delta_{s_1,s_3} \delta_{s_2,s_4} \delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_2, \vec{k}_3+\vec{k}_4}$$

gilt.

Folgendes Vorgehen führt zum Ziel:

1. Transformieren Sie zu Relativ- und Schwerpunktskoordinaten $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}', \ \ \vec{R} = (\vec{r} + \vec{r}')/2$.
2. $\int d^3R$-Integral ausführen (ergibt $V\delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_3,\vec{k}_2+\vec{k}_4}$).
3. $\int d^3s$-Integral in (passende!) Kugelkoordinaten umschreiben und lösen. Fertig!

Tipps:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = ab\cos\vartheta \qquad \text{mit} \qquad \vartheta = \measuredangle\left(\vec{a}, \vec{b}\right)$$

$$\int_0^\pi e^{-ia\cos x} \sin x dx = 2\frac{\sin a}{a}$$

$$\int_0^\infty e^{-ax} \sin bx dx = \frac{b}{a^2 + b^2}$$

$$\delta\left(\vec{k} - \vec{k}'\right) = \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

Aufgabe 8 (8 Punkte): *Quantisierung der Elektron-Phonon Wechselwirkung*
Der Hamiltonoperator der Elektron-Phonon Wechselwirkung lautet in 2. Quantisierung:

$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{1,2} \sum_{n} \langle 1 | \vec{u}_n \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}_n} V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n) | 2 \rangle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2$$

(a) Zeigen Sie, dass gilt:

$$\hat{H}_{\text{el-ph}} = \sum_{\lambda, j, \vec{k}, \vec{q}} D_{\vec{q}j} \left(\hat{b}^\dagger_{j,-\vec{q}} + \hat{b}_{j,\vec{q}} \right) \hat{a}^\dagger_{\lambda, q\vec{+}k} \hat{a}_{\lambda, \vec{k}}$$

$$\text{mit } D_{\vec{q}j} = -i \left(\hbar / (2m\omega_{j,\vec{q}}) \right)^{1/2} \vec{A}_j \cdot \vec{q} V_{\vec{q}}$$

Vorgehensweise:

- Das periodische Potential $V_{\text{ei}}(\vec{r} - \vec{R}_n)$ als Fourierreihe $\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{R}_n)} V_{\vec{k}} \right)$ schreiben.
- $\vec{u}_n$ aus der VL einsetzen und $\vec{\nabla}$ wirken lassen. n-Summe auswerten ($\rightarrow$Kronecker).
- Für $|2\rangle$ und $\langle 1|$ Blochfunktionen einsetzen und über Einheitszellen auswerten ($\rightarrow$Kronecker).
- Nach Indexumbenennungen erhält man das Ergebnis.

(b) Interpretieren Sie das Ergebnis anhand einer Pfeilskizze.