UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Guido Burkard
Matthias Droth

Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2010 - Übungsblatt 5

Ausgabe: 19.11.2010, Abgabe: 26.11.2010, Übung: 29.11.-1.12.2010

Aufgabe 19: Elektronendichte in zweiter Quantisierung (3 Punkte)

Der Operator der Elektronendichte lautet

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i)\,.$$

(N sei die Teilchenzahl und V das Volumen.) Die elektronischen Blochzustände $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ mit gitterperiodischem $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ vereinfachen sich im Jellium-Modell (der Einfluss des Gitters auf die Elektronen wird als *homogener* Hintergrund angenommen) zu ebenen Wellen, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}$. Nutzen Sie dies aus, um $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ mit dem Formalismus der zweiten Quantisierung zu

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} a^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

umzuformen. Was gilt für die Fourierkomponenten $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$?

Aufgabe 20: Strukturfaktor *et al.* (8 Punkte)

a) **Dichtekorrelation**

Nutzen Sie die Ergebnisse aus Aufgabe 19, um die Dichtekorrelation

$$G(\mathbf{r},t) \equiv \frac{1}{N} \int \mathrm{d}^3 r' \, \langle \rho(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, 0)\rho(\mathbf{r}', t)\rangle$$

auf die Form

$$G(\mathbf{r},t) = \frac{1}{NV} \sum_{\mathbf{q}} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(t)\rangle e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

zu bringen. Welche Bedeutung hat $G(\mathbf{r},t)$?

b) **Paarverteilungsfunktion**

Die Paarverteilungsfunktion $g(\mathbf{r})$ ist definiert durch

$$G(\mathbf{r},0) = \delta(\mathbf{r}) + \frac{N}{V} g(\mathbf{r})\,.$$

Nutzen Sie die Definitionen von Dichtekorrelation und Elektronendichte, um

$$g(\mathbf{r}) = \frac{V}{N^2} \sum_{i,j}^{i \neq j} \langle \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_i(0) - \mathbf{r}_j(0)) \rangle$$

zu verifizieren. Was bedeutet $g(\mathbf{r})$ physikalisch?

c) **Strukturfaktoren**
Dynamischer und statischer Strukturfaktor sind definiert als

$$S(\mathbf{q}, \omega) \equiv \int \mathrm{d}^3 r \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, G(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$$

bzw.

$$S(\mathbf{q}) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \, S(\mathbf{q}, \omega).$$

Beweisen Sie die Relationen

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, e^{-i\omega t} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(t) \rangle \,,$$

$$S(\mathbf{q}) = \frac{2\pi}{N} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle.$$

d) **Dynamischer Strukturfaktor bei** $T = 0$
Zeigen Sie, dass für $T = 0$ gilt:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\pi}{N} \sum_n \left| \langle E_n | \rho_{\mathbf{q}}^\dagger | E_0 \rangle \right|^2 \delta \left(\omega - \frac{E_n - E_0}{\hbar} \right) .$$

Dabei sind $\{|E_n\rangle\}$ die Eigenzustände des Hamilton-Operators und $|E_0\rangle$ beschreibt den Grundzustand.
Hinweis: Benutzen Sie das Ergebnis von Teilaufgabe c) und die Heisenbergdarstellung für $\rho_{-\mathbf{q}}(t)$.

Aufgabe 21: Graphische Darstellung und Diskussion **(4 Punkte)**

1. Nutzen Sie die (angegebenen) Ergebnisse aus Aufgabe 20, um mit den exakten Eigenzuständen des Sommerfeld-Modells den statischen Strukturfaktor $S(\mathbf{q})$ bei $T = 0$ zu bestimmen und skizzieren Sie die q-Abhängigkeit.
Hinweis:

$$\int \mathrm{d}^3 k \, \theta(k_F - k) \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) = \frac{4\pi}{3} \theta(k_F - \frac{q}{2}) \left(k_F^3 - \frac{3}{4} q k_F^2 + \frac{q^3}{16} \right) .$$

2. Berechnen Sie ebenso die statische Paarverteilungsfunktion $g(\mathbf{r})$. Skizzieren und diskutieren Sie die r-Abhängigkeit.