

Wdh: Erwartungswerte in symmetrisierten Zuständen (z.B.  $|\uparrow\downarrow\rangle_-$ ) können durch Anwendung der Vertauschungsrelationen berechnet werden.

→ 2-Teilchen Operatoren  $\overset{EW}{\text{zerfallen}}$  in Produkte von 1-Teilchen Op. Erwartungswerte  
 $\downarrow$   
 $"a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger a_\lambda a_\mu"$   $\downarrow$   $"a_\lambda^\dagger a_\lambda"$

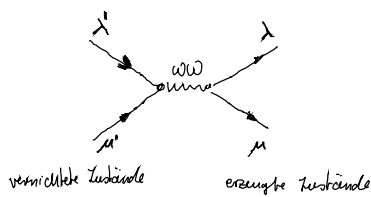
• Hartree-Fock Entkopplung erhält man durch Annahme eines anti-symm. Zustandes

$$\rightarrow H_{eff} = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \left( \epsilon_\lambda + \sum_{\mu=1}^{\infty} \left[ \underbrace{\langle \lambda\mu | \hat{V} | \lambda\mu \rangle}_{\substack{\vdots \\ \delta_{\mu\lambda} \delta_{\lambda\lambda} \\ \text{"Hartree"}}} - \underbrace{\langle \lambda\mu | \hat{V} | \mu\lambda \rangle}_{\substack{\vdots \\ \delta_{\mu\lambda} \delta_{\lambda\mu} \\ \text{"Fock"}}} \right] \langle a_\mu^\dagger a_\mu \rangle \right) a_\lambda^\dagger a_\lambda$$

↑  
1-Teilchen Op.

normierte 1T-Energie, welche WW mit möglichst geringem Fehler berücksichtigt

• Diagrammatische Darstellung der Wechselwirkung



Wechselwirkungs-Matrixelement  
 $\downarrow$   
 $\hat{=} v_{\omega\omega} a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger a_\lambda a_\mu$

### 5.5. Modelle wechselwirkender Elektronensysteme

Ausgangspunkt  $H = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N_e} V(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$  mit  $V(\underline{r}) = V(\underline{r} + \underline{R})$

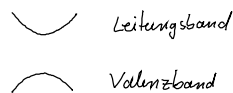
wähle Besetzungszahldarstellung bzgl. Bloch-Basis d.h.  $|\lambda\rangle \hat{=} |n \underline{k} \sigma\rangle$   
 $\uparrow$   $\leftarrow$  Spin  
 $\uparrow$   $\leftarrow$  e 1.82  
 Bandindex

$$\rightarrow \hat{H} = \sum_{\lambda: n \underline{k} \sigma} \epsilon_n(\underline{k}) a_\lambda^\dagger a_\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda: n_\lambda \underline{k}_\lambda \sigma_\lambda \\ \mu: n_\mu \underline{k}_\mu \sigma_\mu \\ \lambda': n_{\lambda'} \underline{k}_{\lambda'} \sigma_{\lambda'} \\ \mu': n_{\mu'} \underline{k}_{\mu'} \sigma_{\mu'}}} a_\lambda^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_\mu a_\lambda \cdot \langle \lambda' \mu' | \hat{V} | \lambda \mu \rangle$$

↑ Coulomb's Potential

• WW hängt nicht vom Spin ab  
 → Matrixelemente enthalten  $\delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4}$

Vereinfachung: 2-Band Modell



• immer abgeschlossene Bänder werden nicht berücksichtigt (z.B. durch Pseudopotenziale)

Nur Leitungsband  
kein Index  $n$

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon(k) a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\substack{k_1, k_4 \\ k_2, k_3}} a_{k_1\sigma}^\dagger a_{k_2\sigma'}^\dagger a_{k_3\sigma'} a_{k_4\sigma} \cdot \int d^3r \int d^3r' \underbrace{\psi_{k_1}(r) \psi_{k_2}(r') \psi_{k_3}(r') \psi_{k_4}(r)}_{u_{k_1 k_2 k_3 k_4}} \frac{e^2}{|r-r'|}$$

Block-Fkt.

Annahme: Quasi-freie Elektronen  $\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr}$

$$u_{k_1 k_2 k_3 k_4} = \frac{1}{V^2} \int d^3r \int d^3r' e^{-ik_1 r} e^{-ik_2 r'} \frac{e^2}{|r-r'|} e^{ik_3 r'} e^{ik_4 r} \quad r'' = r - r'$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3r \int d^3r'' e^{i(k_2 - k_3)r''} \frac{e^2}{|r''|} e^{i(k_4 - k_1 - k_2 + k_3)r}$$

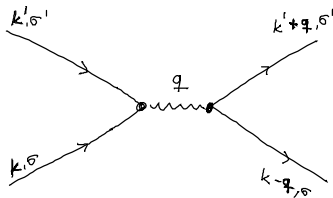
$$= \frac{4\pi e^2}{V |k_2 - k_3|^2} \int_{k_2 - k_3, k_4 - k_1}$$

$$\int d^3r \frac{e^{iqr}}{r} = \frac{4\pi}{q^2}$$

$$\begin{matrix} k_2 - k_3 = q \\ \downarrow \\ k_2 = k_1 + q \\ \downarrow \\ k_3 = k_1 \\ \downarrow \\ k_4 - k_1 = q \\ \downarrow \\ k_4 = k_1 \end{matrix} \rightarrow \int_{k_2 - k_3, k_4 - k_1} = 1$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{kk'q} \frac{4\pi e^2}{q^2} a_{k-q, \sigma}^\dagger a_{k'+q, \sigma'}^\dagger a_{k', \sigma'} a_{k, \sigma} \quad \otimes$$

Impulsübertrag bei WW als Quantenzahl



Hamiltonian des homogenen Elektronengases

- Falls als Basis nicht Block-Fkt sondern Wannier-Funktionen gewählt werden:  $w_k(r-B) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k'} e^{ik'r} \psi_{k'}(r)$

Block-Fkt

$$\equiv |u_R\rangle$$

Annahme: durch gute Lokalisierung der  $|u_R\rangle$  kann näherungsweise <sup>nur nächste</sup> Nachbar WW (oder übernalste) Nachbar WW betrachtet werden

Bem: Für Einteilchen-Hamiltonian ergibt die Annahme der DW-WW die Tight-Binding Näherung

$$\langle \psi | = \langle R | \frac{p^2}{2m} + V(x) | R' \rangle$$

$R, R'$  sind nächste Nachbarn

• Für 2-Feldchen Matrixelemente:

$U = U_{RRRR}$	← Gitterplatzdiagonale Kopplung	Größenordnung $U \sim 20eV$
$V = U_{RR',RR}$	← Kopplung nächster Nachbarn	$V \sim 6eV$
$X = U_{RR,RR'}$	← konditioneller Hüpf.-WW	$X \sim 0.5eV$

**Hubbard-Modell**

$$\hat{H} = \sum_{R\sigma} \sum_{R'} t a_{R\sigma}^+ a_{R'\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{R\sigma\sigma'} a_{R\sigma}^+ a_{R\sigma'}^+ a_{R\sigma'} a_{R\sigma}$$

↑  
Hüpf-Matrixelement  
(Bandbreite der Delokalisierung)

↑  
nur WW am gleichen Ort  
(d.h. nur WW von Elektronen mit ungleichem Spin)

- nur U berücksichtigt

Hubbard-Modell: kann beschreiben  
- Metall-Isolator Übergang  
- Anti-Ferromagnetismus  
- Supraleitung

**erweitertes Hubbard-Modell**

$$\hat{H} = \sum_{R\sigma} \sum_{R'} t a_{R\sigma}^+ a_{R'\sigma} + U \sum_R a_{R\uparrow}^+ a_{R\uparrow} a_{R\downarrow}^+ a_{R\downarrow} + \frac{1}{2} V \sum_{R,R'} \sum_{\sigma,\sigma'} a_{R\sigma}^+ a_{R\sigma} a_{R'\sigma'}^+ a_{R'\sigma'}$$

weitere Erweiterungen z.B. Mehrband-Hubbard-Modell  
oder z.B. spinloses Fermion Modell ( $U=0$ )

Jellium Modell des homogenen Elektronengases

• betrachte konstante pos. Hintergrundladung anstatt des Potentials  $V(x)$   
↳ FT-Coulombs WW

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \sum_{k,q\sigma} \frac{4\pi e^2}{q^2} g(q) a_{k-q,\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{kk',q\sigma\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} a_{k-q,\sigma}^+ a_{k'+q,\sigma'}^+ a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

$g(q)$  Fourier transformierte pos. Hintergrundladung  
 $g(r) = \sum_{\vec{q}} g(-\vec{q}) e^{i\vec{r}\vec{q}}$

$H_{WW}$

mit Hartree-Fock Entkopplung

$$H_{WW} = \frac{1}{V} \sum_{kk',q\sigma\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \left( \langle a_{k'+q,\sigma'} a_{k'\sigma'} \rangle a_{k-q,\sigma}^+ a_{k\sigma} - \langle a_{k-q,\sigma}^+ a_{k'\sigma'} \rangle a_{k'+q,\sigma'}^+ a_{k\sigma} \right)$$

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Feldoperatoren:} \\ \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}) := \sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}^*(\underline{r}) \hat{a}_{\lambda}^\dagger \\ \hat{\psi}(\underline{r}) := \sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}(\underline{r}) \hat{a}_{\lambda} \end{array} \right]$$

Rechenrechnung:

$$S(\underline{q}) = \frac{1}{V} \int \langle \hat{S}(\underline{r}) \rangle e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} d^3r \quad \begin{array}{l} \text{Feldtheorie} \\ \downarrow \\ \text{(Entwicklungscoeffizienten)} \end{array}$$

$$= \frac{1}{V} \int \langle \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}) e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} \hat{\psi}(\underline{r}) \rangle d^3r$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}, \underline{k}', \sigma'} \delta(\underline{k} - \underline{k}' - \underline{q}) \langle a_{\underline{k}\sigma'}^\dagger a_{\underline{k}'\sigma'} \rangle$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}\sigma'} \langle a_{\underline{k}+\underline{q}\sigma'}^\dagger a_{\underline{k}\sigma'} \rangle$$

erster Term <sup>in H<sub>0</sub></sup> hebt sich genau mit dem Term der Hintergrundladung <sup>S(q)</sup> weg

$$\rightarrow E_{HF} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}'} \frac{4\pi e^2}{|\underline{k} - \underline{k}'|^2} \langle a_{\underline{k}'\sigma}^\dagger a_{\underline{k}'\sigma} \rangle$$

renormierte Einteilchenenergie vom  
Fellium Modell + HF Näherung

• analytisch lösbar und zeigt durch "Austauschloch"  
durch Pauli-Abstoßung

• Problem: Divergenz bei  $\underline{k} = \underline{k}'$  → Lösung durch Abschirmungsmasse