

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

→ 2-Teilchen Operatoren $\overset{FW}{\text{zerfallen}}$ in Produkte von 1-Teilchen Op. Erwartungswerte

$$a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger a_\lambda a_\mu \quad \downarrow \quad a_\lambda^\dagger a_\lambda$$

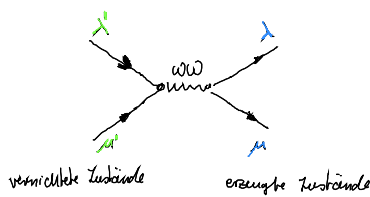
• Hartree-Fock Entkopplung erhält man durch Annahme eines anti-symm. Zustandes

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

↑
1-Teilchen Op.

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

• Diagrammatische Darstellung der Wechselwirkung



Wechselwirkungs-Matrixelement

$$\hat{V}_{\omega\omega} a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger a_\lambda a_\mu$$

5.5. Modelle wechselwirkender Elektronensysteme

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

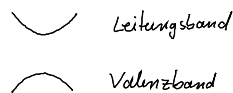
wähle Besetzungszahldarstellung bzgl. Bloch-Basis d.h. $|\lambda\rangle \hat{=} |n \in \sigma\rangle$
 ↑ Spin
 ↑ Bandindex $\in 1..82$

$$\hat{H} = \sum_{\lambda: n \in \sigma} \epsilon_n(k) a_\lambda^\dagger a_\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda: n_1 k_1 \sigma_1 \\ \mu: n_2 k_2 \sigma_2 \\ \lambda': n_3 k_3 \sigma_3 \\ \lambda'': n_4 k_4 \sigma_4}} a_\lambda^\dagger a_{\mu'}^\dagger a_\mu a_\lambda \cdot \langle \lambda' \mu' | \hat{V} | \lambda \mu \rangle$$

↑ Coulomb 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

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

Blatt-Pkt.
↓

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

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

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

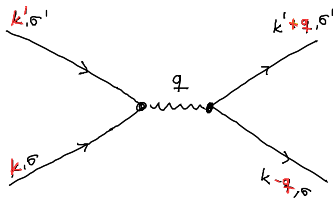
$$= \frac{4\pi e^2}{V |k_2 - k_3|^2} \int_{k_2 - k_3, k_4 - k_1}$$

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

$$\begin{aligned} k_1 - k_2 &= q \\ k_2 - k_3 &= q \\ k_3 - k_4 &= q \\ k_4 - k_1 &= q \end{aligned} \rightarrow \int_{k_2 - k_3, k_4 - k_1} = 1$$

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

Impulsübertrag bei WW als Quantenzahl



Hamiltonian des homogenen Elektronengases

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

$$\equiv |u_R\rangle$$

Annahme: durch gute Lokalisierung der $|u_R\rangle$ kann näherungsweise ^{naheste} Nachbar WW (oder überälteste) Nachbar WW betrachtet werden

Bem: Für Ein-Elektron-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-Elektron Matrixelemente:

- $U = U_{RRRR}$ ← Gitterplatzdiagonale Kopplung
- $V = U_{RR', RR}$ ← Kopplung nächster Nachbarn
- $X = U_{RR, RR'}$ ← konditioneller Hüpf-WW

Größenordnung
 $U \sim 20\text{eV}$
 $V \sim 6\text{eV}$
 $X \sim 0.5\text{eV}$

Hubbard-Modell

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

t
 Hüpf-Matrixelement
 (Bandbreite der Delokalisierung)

U
 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

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

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 $V(x)$

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - \sum_{kq\sigma} \frac{4\pi e^2}{q^2} \underbrace{S(q)}_{\leftarrow \text{FT-Coulombs WW}} a_{k-q,\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{kk'q\sigma\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} a_{k-q,\sigma}^\dagger a_{k'+q,\sigma'}^\dagger a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

H_{WW}

$S(q)$ Fourier transformierte pos. Hintergrundladung
 $S(r) = \sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}}$

mit Hartree-Fock Entkopplung

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

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

Rechenrechnung:

$$\begin{aligned}
 S(\underline{q}) &= \frac{1}{V} \int \langle \hat{S}(\underline{r}) \rangle e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} d^3r && \text{Feldtheorieop.} \\
 &= \frac{1}{V} \int \langle \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}) e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} \hat{\psi}(\underline{r}) \rangle d^3r && \text{(Erweiterungskoeffizienten)} \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{k k' \sigma'} \delta(k - k' - \underline{q}) \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma'} \rangle \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{k' \sigma'} \langle a_{k'+\underline{q}\sigma'}^\dagger a_{k'\sigma'} \rangle
 \end{aligned}$$

erster Term ^{in HW} hebt sich genau mit dem Term der Hintergrundladung ^{gleich} weg

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

renormierte Einheitsenergie vom
Fermion Modell + HF Näherung

- analytisch lösbar und zeigt durch "Austauschloch" durch Pauli-Abstoßung
- Problem: Divergenz bei $k=k'$ → Lösung durch Abschirmungsmaschine