

Abgabe: bis zum 17.Nov.2009, 10:00 Uhr im Postfach von Prof. Rieger

1 Elektronenwechselwirkung auf einem Gitter: Hubbard Modell

Nehmen Sie ein System von Elektronen an, welche sich auf Gitterplätzen R_i befinden. $\varphi_{i\sigma}(x) = \chi_\sigma \varphi_i(x)$ bezeichnen die Einteilchenwellenfunktionen mit $\varphi_i(x) = \phi(x - R_i)$ und Spinanteil σ . Dieses System wird durch den spinunabhängigen Hamiltonoperator $H = T + V$ beschrieben, welcher sich aus der Summe von Einteilchenoperatoren $T = \sum_{\alpha=1}^N t_\alpha$ und Zweiteilchenoperatoren $V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V^{(2)}(x_\alpha, x_\beta)$ zusammensetzt. In der Basis $\varphi_{i\sigma}$ kann er geschrieben werden als

$$H = \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} V_{ijkl} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma'}^\dagger a_{l\sigma'} a_{k\sigma}. \quad (5.1)$$

a) Rechtfertigen Sie für den Fall *lokalisierter* Wellenfunktionen $\varphi_{i\sigma}$ folgende Annahmen:

$$t_{ij} = \begin{cases} w, & \text{für } i = j \\ t, & \text{falls } i, j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.2)$$

und

$$V_{ijkl} = V_{ij} \delta_{il} \delta_{jk} \quad \text{with} \quad V_{ij} = \int d^3x \int d^3y |\varphi_i(x)| V^{(2)}(x, y) |\varphi_j(y)|. \quad (5.3)$$

b) Berechnen Sie das Matrixelement V_{ij} des kurzreichweitigen Potentials

$$V = \frac{\lambda}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \delta(x_\alpha - x_\beta) \quad (5.4)$$

für die Fälle $i = j$ und für i, j nächste Nachbarn.

c) Wir nehmen an, die lokalisierten Wellenfunktionen auf einem Quadratgitter mit Kantenlänge a sind Gaußpakete der Form $\phi(x) \propto \exp(-x^2/2\Delta^2)$, dabei ist Δ ein Maß für die Lokalisierung. Im Fall $\Delta \ll a$ dominiert $V_{ii} = U$. Geben Sie für diesen Fall H in zweiter Quantisierung an! Dieses Modell wird als *Hubbard Modell* bezeichnet.

2 Wasserstoffmolekül: Heitler-London Approach

Die folgende Übung beschäftigt sich mit der Modellierung des Wasserstoffmoleküls H_2 nach Heitler und London. Der Hamiltonoperator des Systems ist gegeben durch:

$$H = H_p + H_e \quad (5.5)$$

$$H_p = \frac{p_A^2}{2M} + \frac{p_B^2}{2M} + \frac{e^2}{r_{AB}} \quad (5.6)$$

$$H_e = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} - \frac{e^2}{r_{2B}} + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (5.7)$$

wobei sich die Indizes A, B (1,2) auf die beiden Protonen (die beiden Elektronen) beziehen. Anlehnend an die Born-Oppenheimer Approximation nehmen wir den Abstand r_{AB} zwischen den beiden Protonen als

konstant an, da sie sich nahezu in Ruhe befinden ($M \gg m$) und berechnen H_e als Funktion des Parameters R_{AB} .

Die Idee von Heitler und London ist recht einfach. Man beginnt mit den Grundzustandswellenfunktionen $1s$ für die Elektronen der einzelnen Protonen. Diese lautet für Proton A :

$$u_A(x) = (Za_0)^{-3/2} 2e^{-|x-x_A|/(Za_0)} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (5.8)$$

analog für Proton B . a_0 bezeichnet dabei den Bohrschen Radius und weiter sei $Z = 1$ (ein Proton) im Folgenden.

1) Zuerst vernachlässigen wir die Spinkomponente der 2-Elektronenwellenfunktion. Konstruieren Sie ausgehend von u_A und u_B eine symmetrische Wellenfunktion ϕ_S , sowie eine antisymmetrische Wellenfunktion ϕ_A in Bezug auf Permutationen der Elektronen 1 und 2. N_+ und N_- bezeichnen die zugehörigen Normalisierungskonstanten.

2) Jetzt wollen wir den Spin der Elektronen berücksichtigen. Konstruieren Sie unter Berücksichtigung, dass Elektronen Fermionen sind, die verschiedenen Wellenfunktionen.

3) Zeigen Sie, dass N_{\pm} durch

$$N_{\pm}^{-1} = 2(1 \pm S^2) \quad , \quad S = \int d^3r u_A(r)u_B(r) \quad (5.9)$$

gegeben ist und berechnen Sie das Überlappintegral $S = e^{-D}(1 + D + D^2/3)$, mit $D = r_{AB}/a_0$.

4) Berechnen Sie den Erwartungswert von $\langle H_e \rangle_{\pm}$ für obige Zustände:

$$\langle H_e \rangle_{\pm} = 2E_0 + \frac{C \pm K}{1 \pm S^2} \quad (5.10)$$

$$C = e^2 \int d^3r_1 d^3r_2 u_A^2(r_1)u_B^2(r_2) \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{2B}} \right) \quad (5.11)$$

$$K = e^2 \int d^3r_1 d^3r_2 u_A(r_1)u_B(r_1)u_A(r_2)u_B(r_2) \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{2B}} \right) \quad (5.12)$$

und geben Sie den Grad der Entartung an. Welches ist der Grundzustand?

5) Zeigen Sie durch Berechnen der Integrale C und K , dass die symmetrische Wellenfunktion zu einem gebundenen Zustand führt.