

Prof. Dr. Eckehard Schöll, PhD

Dr. Alexander Carmele, Dr. Julia Kabuß, Dr. Steffen Martens, Jan Tötz, M.Sc.

4. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II**Abgabe: Mo. 17.11.2014 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude***Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.***Aufgabe 9 (9 Punkte): Unterscheidbare und ununterscheidbare Teilchen**Betrachten Sie die Wellenfunktion eines Zwei-Teilchenzustands $\psi_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

- Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für unterscheidbare und ununterscheidbare Teilchen in diesem Zustand.
- Diskutieren Sie das Ergebnis aus a) für ununterscheidbare Teilchen unter der Annahme, dass $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$ gilt.
- Wählen Sie für die Wellenfunktionen der Einteilchenzustände in a) ebene Wellen. Wie sieht damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für klassische Teilchen, Bosonen und Fermionen aus?

Aufgabe 10 (11 Punkte): Homogenes Elektronengas in Hartree-Fock-NäherungBetrachten Sie das Modell eines freien Elektronengases aus N_e Elektronen mit Coulombabstoßung untereinander. In erster Quantisierung ist der Hamilton-Operator für dieses Modell gegeben durch

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N_e} \int_V d^3r' \frac{\rho_0}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}'|} + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1, j \neq i}^{N_e} \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|}$$

dabei ist ρ_0 die positive Hintergrundladungsdichte. Da wegen der Ladungsneutralität die positive und negative Ladungsdichte gleich sind, gilt:

$$\rho_0 = e \sum_{\mathbf{k}'} |\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')|^2.$$

- (a) Zeigen Sie, dass mit diesem Ansatz für die Hartree-Fock-Gleichung folgt:

$$(1) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\mathbf{k}'} \int d^3r' \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \epsilon_{HF}(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

- Nehmen Sie für die Einteilchen-Wellenfunktionen in Gl. (1) ebene Wellen $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ an. Zeigen Sie, dass man damit $\epsilon_{HF}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{\epsilon_0 V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}$ erhält.
- Für den Grundzustand ist die \mathbf{k}' -Summe über die energetisch niedrigst liegenden, besetzten Zustände bis zur Fermikante k_F auszuwerten. Diese Summe kann explizit durch den Übergang zum Integral berechnet werden:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}', k' < k_F} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} = \frac{1}{2\pi^2} k_F \left[\frac{1}{2} + \frac{1 - (k/k_F)^2}{4(k/k_F)} \ln \left| \frac{1 + k/k_F}{1 - k/k_F} \right| \right]$$

Geben Sie damit die Einteilchenenergien in Hartree-Fock-Näherung explizit an. Plotten und vergleichen Sie den Verlauf der Hartree-Fock-Dispersion des homogenen Elektronengases mit der Dispersion freier Elektronen. Sie dürfen dazu die Näherungen $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m a_0^2} \left(\frac{k}{k_F}\right)^2$ und $e^2 k_F = \frac{e^2}{a_0}$ benutzen (a_0 Bohrscher Radius). Verwenden Sie sinnvolle Einheiten!

4. Übung TPV WS14/15

Vorlesung:

- Dienstags 8:15 Uhr – 10:00 Uhr im EW 203.
- Donnerstags 8:15 Uhr – 10:00 Uhr im EW 203.

Tutorien:

- Mi. 08–10 Uhr im EW 731
- Do. 10–12 Uhr im EW 229
- Do. 12–14 Uhr im EW 731
- Fr. 12–14 Uhr im EW 731.

Sprechzeiten:

- Mi. 14–15 Uhr im EW 704 bei Alexander Carmele
- Fr. 14–15 Uhr im EW 703 bei Julia Kabuß
- Do. 15–16 Uhr im EW 737 bei Steffen Martens
- Do. 15–16 Uhr im EW 627 bei Jan Tötz

Scheinkriterien:

- Mindestens 50% der Übungspunkte.
- Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Tutorien.
- Bearbeitung und Vorstellung eines Projektes (Projektvorstellung in der letzten Vorlesungswoche).

Literatur zur Lehrveranstaltung:

- Udo Scherz, Quantenmechanik, Eine kompakte Einführung, Teubner, U Wiesbaden 2005.
- Eugen Fick, Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie, 6. Auflage, Aula-Verlag, Wiesbaden 1988.
- Franz Schwabl, Quantenmechanik 1 & 2, 7. Auflage, Springer-Lehrbuch, Berlin 2007 (auch als ONLINE-Ressource).
- Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1,2: Quantenmechanik, 5. Auflage, Springer-Lehrbuch, Berlin 2002 (auch als ONLINE-Ressource).
- Albert Messiah, Quantenmechanik; Bd. 1 u. 2. Berlin : de Gruyter, 1990.
- Heinrich Mitter, Quantentheorie, 2., überarb. Aufl., unveränd. Nachdr. , BI-Wiss.-Verl., 1987.
- Walter Greiner, Relativistische Quantenmechanik und Quantentheorie-Spezielle Kapitel, Verlag Harri Deutsch.