Technische Universität Berlin
Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. A. Knorr
Dr. Jens Förstner
Dipl-Phys. Jan Schlesner, Dipl-Phys. Philipp Zedler
Janis Nötzel

18. Dezember 2006

www.itp.tu-berlin.de/tpii-ws06.html

9. Übungsblatt zur Theoretischen Physik II

Vielteilchensysteme

Abgabe: Montag, 8. Januar 2006 bis 13:00 Uhr in den Briefkasten im Physik-Altbau.

Aufgabe 23 (8 Punkte): *Potentialtopf mit mehreren Elektronen*
Zwei bzw. drei identische Teilchen sollen sich wechselwirkungsfrei in einem eindimensionalem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden bewegen:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } |\vec{r}| < r_0 \\ \infty & \text{für } |\vec{r}| \geq r_0 \end{cases}$$

Der Spinzustand Systems möge symmetrisch gegenüber Teilchenvertauschungen sein. Die Einzelspins seien parallel, die Teilchen sollen also dieselbe magnetische Quantenzahl m_s besitzen.

1. Formulieren Sie den Hamiltonoperator des Zwei-Teilchen-Systems. Zeigen Sie, daß die Energieeigenzustände in einen Orts- und einen Spinanteil separieren. Welche Symmetrie muß der Ortsanteil des Gesamtzustandes besitzen, wenn es sich bei den beiden Teilchen um Bosonen bzw. Fermionen handelt?

2. Berechnen Sie die möglichen Eigenzustände und Eigenenenergien für zwei Bosonen bzw. zwei Fermionen.

3. Geben Sie die Grunzustandsenergie für zwei Bosonen bzw. zwei Fermionen an.

4. Bestimmen Sie die Wellenfunktionen für den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand eines Systems mit drei identischen s=0 Teilchen. Geben Sie auch die zugehörigen Energie an.

Aufgabe 24 (12 Punkte): *Homogenes Elektronengas*

In der Vorlesung wurden die Hartree-Fock-Gleichungen zur Beschreibung eines Mehrelektronensystems im Potential $V_K(\vec{r})$ vorgestellt:

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r}) \quad &= \quad \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_K(\vec{r}) \right) \varphi_\alpha(\vec{r}) \\ &\quad + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_\beta \int d^3r' \frac{|\varphi_\beta(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \varphi_\alpha(\vec{r}) \\ &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_\beta \delta_{m_{s_\alpha}, m_{s_\beta}} \int d^3r' \frac{\varphi_\beta^*(\vec{r}')\varphi_\beta(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \varphi_\alpha(\vec{r}') \end{aligned}$$

Es seien nun ebene Wellen wie folgt definiert:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Die Zustände seien durch das Indexpaar $\alpha = (\vec{k}_\alpha, m_{s_\alpha})$ definiert, wobei $\vec{k}$ der Wellenzahlvektor der ebenen Welle ist und m_{s_α} die Spinquantenzahl.

1. Betrachten Sie zuerst ein freies System mit N Elektronen ohne Coulombwechselwirkungen im Grundzustand. Welche Zustände sind besetzt? Argumentieren Sie, dass eine Fermikante mit $|\vec{k}| < k_F$ existiert.

   (a) Zeigen Sie, daß die Fermikante durch $k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3}$ gegeben ist, wobei $n = \frac{N}{\Omega}$ die Elektronendichte im Volumen Ω sei.

   (b) Bestimmen Sie die kinetische Energie E^0_α eines freien Elektrons im Zustand $\alpha = (\vec{k}, m_s)$.

2. Im sogenannten Jellium-Modell wird ein konstantes (sozusagen sehr gleichmässig verteiles) Kernpotential angenommen: $V_K(\vec{r}) = -V_0$. Berechnen Sie die Hartree-Fock Energien ε_α für dieses Modell. Man erhält:
$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} k_F F(k/k_F) \text{ mit } F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|$$
Zeigen Sie zuerst, daß der direkte Term nicht von $\vec{k}$ abhängt und daher durch das Einteilchenpotential $-V_0$ aufgehoben wird. Bestimmen Sie dann den Austauschterm.

3. Geben Sie die mittlere kinetische Energie und mittlere Austauschenergie pro Elektron an.

Tipps:

- Nutzen Sie $\frac{1}{V}\sum_{|\vec{k}|<k_F} \approx \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{|\vec{k}|<k_F} d^3k$.
- Falls hilfreich, zeigen und verwenden Sie $\int_{-1}^{1} \frac{1}{k^2+k'^2-2kk'x} dx = \frac{1}{kk'} \ln \frac{|k+k'|}{|k-k'|}$.
- Ein Weg führt über die Zerlegung des Coulombpotentials in Fourierkomponenten $V(\vec{s}) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\vec{q}} V_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{s}}$. Für $V(\vec{s}) = \frac{1}{|\vec{s}|}$ erhält man $V_q = \frac{4\pi}{q^2}$ wenn $q \neq 0$ und $V_0 = \int_\Omega d^3s \frac{1}{|\vec{s}|}$ wenn $q = 0$.

- **Internetseite der Veranstaltung:** http://www.itp.tu-berlin.de/tpii-ws06.html
- **Vorlesung:** Mittwoch 12:15 - 14:00 Uhr und Freitag 10:15 - 12:00 Uhr im PN 203
- **Ergänzungen zur Quantenmechanik:** Vorlesung von Prof. Muschik, mittwochs von 8:30 bis 10:00 Uhr im Raum P 164
- **Literatur:**
  - U. Scherz, Quantenmechanik - Eine kompakte Einführung (Teubner, 2005)
  - R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, Feynman Vorlesungen über Physik, Band 3, Quantenmechanik (Oldenburg, 2001)
  - W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1 und 5/2 (Springer, 2002)
  - F. Schwabl, Quantenmechanik (Springer 1993)
  - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Quantenmechanik 1 und 2 (de Gruyter 1999)
- **Tutorien:**
  - Dienstag 8:15 - 10:00 Uhr im P-N 229 (Jan Schlesner)
  - Mittwoch 10:15 - 12:00 Uhr im P-N 246 (Janis Nötzel)
  - Mittwoch 14:15 - 16:00 Uhr im P-N 226 (Janis Nötzel)
  - Donnerstag 12:15 - 14:00 Uhr im P-N 114 (Jens Förstner)
  - Freitag 12:15 - 14:00 Uhr im P-N 226 (Philipp Zedler)
- **Scheinkriterien:** 50% der Punkte aus den Übungszetteln, aktive Teilnahme an den Tutorien und bestandene Klausur
- **Sprechstunden:**
  - Prof. Dr. A. Knorr Di, 13 - 14 Uhr im P-N 742
  - Jan Schlesner Do, 13:30-14:30 Uhr im P-N 627
  - Philipp Zedler Mi, 11-12 Uhr im P-N 711
  - Janis Nötzel Fr, 14-15 Uhr im MA 723
  - Jens Förstner Mi, 15-16 Uhr im P-N 152
- **Klausur:** Mittwoch, 7. Februar 2007, 12:00 - 14:00. Raum wird noch bekannt gegeben.
- **Mathematica-Kurs:** http://www.physik.tu-berlin.de/pcpool/kurse/mathematica/