

Prof. Dr. Eckehard Schöll, PhD und Dr. Kathy Lüdge

Dr. Clive Emary, Dipl. Phys. Stefan Fruhner, Dipl. Phys. Miriam Wegert, Dipl. Phys. Philipp Zedler

4. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II**Abgabe: Mo. 16.11.2009 bis 18:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude und mit ISIS***Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.***Aufgabe 9 (6 Punkte): Spin**Der Zustand $|a\rangle$ ist gegeben als eine Überlagerung zweier Spinzustände:

$$|a\rangle = b_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Berechnen Sie die Erwartungswerte der Spinoperatoren $\langle \hat{S}_x \rangle$, $\langle \hat{S}_y \rangle$ und $\langle \hat{S}_z \rangle$ im Zustand $|a\rangle$.**Aufgabe 10 (6 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 11 (8 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

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

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:

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

Geben Sie damit die Einteilchenenergien in Hartree-Fock-Näherung explizit an. Vergleichen Sie den Verlauf der Hartree-Fock-Dispersion des homogenen Elektronengases mit der Dispersion freier Elektronen. Sie dürfen dazu die Näherungen $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \left(\frac{k}{k_F}\right)^2$ und $e^2 k_F = \frac{e^2}{a_0}$ benutzen (a_0 Bohrscher Radius). Verwenden Sie sinnvolle Einheiten!

4. Übung TPV WS09/10

- Vorlesung:**
- Dienstags 8:30 Uhr – 10:00 Uhr in EW 203.
 - Donnerstags 8:30 Uhr – 10:00 Uhr in EW 203.

- Tutorien:**
- Di 12 – 14h EW 182
 - Di 14 – 16h EW 226
 - Mi 08 – 10h EW 731
 - Do 12 – 14h EW 184

- Klausur:**
- Donnerstag, den 04.02.2010, von 08:00 – 10:00 Uhr in EW 201.

- Scheinkriterien:**
- Mindestens 50% der Übungspunkte.
 - Bestandene Klausur.
 - Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Tutorien.

Literatur zur Lehrveranstaltung:

Siehe auch Semesterapparat in der Physikbibliothek.

- 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-Resource)
- Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1,2: Quantenmechanik, 5. Auflage, Springer-Lehrbuch, Berlin 2002 (auch als ONLINE-Resource)
- Albert Messiah, Quantenmechanik; Bd. 1 u. 2. Berlin : de Gruyter, 1990
- Heinrich Mitter, Quantentheorie, 2., überarb. Aufl., unveränd. Nachdr. , BI-Wiss.-Verl., 1987

Sprechzeiten:

Name	Tag	Zeit	Raum	Tel.
Prof. Dr. E. Schöll, PhD	Mi.	14:30 - 15:30	EW 735/36	23500
Dr. Kathy Lüdge	Do.	15:00 - 16:00	EW 741	23002
Dr. Clive Emary	Di.	16:00 - 17:00	EW 705	22741
Stefan Fruhner	Fr.	13:30 - 14:30	EW 627/28	27681
Miriam Wegert	Mi.	13:00 - 14:00	EW 279	24474
Philipp Zedler	Mi.	11:00 - 12:00	EW 711	27884