

Prof. Dr. Andreas Knorr
 Dr. Carsten Weber
 Dipl. Phys. Alexander Carmele
 Dipl. Phys. Ken Lichtner

7. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Fr. 10.12.2010 12:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 18 (14 Punkte): Homogenes Elektronengas

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

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha \varphi_\alpha(\mathbf{r}) = & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{Kern}}(\mathbf{r}) \right) \varphi_\alpha(\mathbf{r}) \\ & + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_\beta \int d^3r' \frac{|\varphi_\beta(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_\alpha(\mathbf{r}) \\ & - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_\beta \delta_{m_{s\alpha}, m_{s\beta}} \int d^3r' \frac{\varphi_\beta^*(\mathbf{r}') \varphi_\beta(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_\alpha(\mathbf{r}') \end{aligned}$$

Es seien nun ebene Wellen wie folgt definiert:

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

Die Zustände seien durch das Indexpaar $\alpha = (\mathbf{k}_\alpha, m_{s_\alpha})$ definiert, wobei \mathbf{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 $|\mathbf{k}| < k_F$ existiert.

- (a) Zeigen Sie, dass die Fermikante durch $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ gegeben ist, wobei $n = \frac{N}{\Omega}$ die Elektronendichte im Volumen Ω sei.
- (b) Bestimmen Sie die kinetische Energie E_α^0 eines freien Elektrons im Zustand $\alpha = (\mathbf{k}, m_s)$.

2. Im sogenannten Jellium-Modell wird ein konstantes, gleichmäßig verteiltes Kernpotential angenommen: $V_{\text{Kern}}(\mathbf{r}) = -V_0$. Berechnen Sie die Hartree-Fock Energien ε_α für dieses Modell. Man erhält:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0} k_F \cdot \tilde{f}(k/k_F) \quad \text{mit} \quad \tilde{f}(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

Zeigen Sie zuerst, dass der direkte Term nicht von \mathbf{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 $\frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \approx \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| < k_F} d^3k$
- Falls hilfreich, zeigen und verwenden Sie $\int_{-1}^1 \frac{1}{k^2 + k'^2 - 2kk'x} dx = \frac{1}{kk'} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right|$

7. Übung TPV WS10/11

- Ein Weg führt über die Zerlegung des Coulombpotentials in Fourierkomponenten $V(\mathbf{s}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{s}}$. Für $V(\mathbf{s}) = \frac{1}{|\mathbf{s}|}$ erhält man $V_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi}{q^2}$ wenn $q \neq 0$ und $V_0 = \int_{\Omega} d^3s \frac{1}{|\mathbf{s}|}$ wenn $q = 0$.

Aufgabe 19 (6 Punkte): *Gestörter harmonischer Oszillator*

Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oszillator H_0 , der durch ein kubisches Potential V gestört wird.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2, \quad V = \varepsilon\hbar\omega \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} q^3$$

Berechnen Sie unter Verwendung von Leiteroperatoren ($b = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}p$) die störungstheoretischen Energiekorrekturen erster und zweiter Ordnung sowie die Zustandskorrektur erster Ordnung. Geben Sie schliesslich speziell die Korrekturen für den Grundzustand an.