

Prof. Dr. Harald Engel  
 Dipl. Phys. Mathias Hayn  
 Wassilij Kopylov, M.Sc.  
 Jan Tötz, M.Sc.

## 7. Übungsblatt – Quantenmechanik II

**Abgabe: Di. 18. 12. 2012 bis 18:00 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 3er-Gruppen erfolgen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummer und das Tutorium an!*

### **Aufgabe 15 (7 Punkte): Hartree–Fock-Theorie für Bosonen**

In dieser Aufgabe soll die Hartree–Fock-Gleichung für ein System aus  $N$  ununterscheidbaren Bosonen hergeleitet werden. Im Gegensatz zu dem fermionischen Problem handelt es sich in der Tat nur um eine Gleichung, da der Ansatz für den Hartree–Fock-Zustand nur *ein* Ein-Teilchen-Orbital, welches wir mit  $\lambda$  bezeichnen, beinhaltet:

$$|\Phi_0\rangle = \sqrt{\frac{1}{N!}} \left[ \hat{a}_\lambda^\dagger \right]^N |\text{vac}\rangle = |\{n_\nu = 0 | \nu \neq \lambda\}, n_\lambda = N\rangle. \quad (1)$$

Die Menge von Quantenzahlen, welche auch  $\lambda$  enthält, sei mit  $\{\nu\}$  bezeichnet. Die Transformation der Feldoperatoren auf diesen Satz von Quantenzahlen lautet

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_\nu \varphi_\nu(\mathbf{x}) \hat{a}_\nu. \quad (2)$$

Der Hamilton-Operator eines Systems wechselwirkender Bosonen in einem Potential  $V(\mathbf{x})$  ist durch

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad (3)$$

mit

$$\hat{H}_1 = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad \text{und} \quad (4)$$

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (5)$$

gegeben.

- (a) Berechnen Sie die Erwartungswerte der Operatoren  $\hat{H}_1$  und  $\hat{H}_2$  im Hartree–Fock-Zustand (1).
- (b) Extremalisieren Sie das Energiefunktional  $E[\varphi_\lambda(\mathbf{x}), \varphi_\lambda^*(\mathbf{x})] = \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H}_2 | \Phi_0 \rangle$  unter der Nebenbedingung  $N = \int d^3x \langle \Phi_0 | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle$ . Was ist die Bedeutung dieser Nebenbedingung? Leiten Sie damit die Hartree–Fock-Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) + (N-1) \int d^3x' |\varphi_\lambda(\mathbf{x}')|^2 U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right\} \varphi_\lambda(\mathbf{x}) = \mu \varphi_\lambda(\mathbf{x}) \quad (6)$$

mit dem Lagrange-Parameter  $\mu$  her.

- (c) Vergleichen Sie die Hartree–Fock-Gleichung (6) für Bosonen mit der für Fermionen aus der Vorlesung. Wie würden Sie die Hartree–Fock-Gleichung (6) lösen?

7. Übung TPV WS12/13

**Aufgabe 16 (13 Punkte): Hartree-Fock-Verfahren für ein Elektronengas-Modell**

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

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

Wir nehmen als Lösung ebene Wellen an:  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . Die Zustände seien durch das Indexpaar  $\alpha = (\mathbf{k}_\alpha, m_{s\alpha})$  definiert, wobei  $\mathbf{k}$  der Wellenzahlvektor der ebenen Welle ist und  $m_{s\alpha}$  die Spinquantenzahl. Im sogenannten Jellium-Modell wird ein konstantes, gleichmäßig verteiltes Kernpotential angenommen:  $V_{\text{Kern}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{N}{V} V_0$ . Berechnen Sie die Hartree-Fock Energien eines Elektrons  $\varepsilon_\alpha$  für dieses Modell. Man erhält:

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

Zeigen Sie zuerst, dass der direkte Term nicht von  $\mathbf{k}$  abhängt und daher durch das Einteilchenpotential  $V_{\text{Kern}}$  aufgehoben wird. Bestimmen Sie dann den Austauschterm. 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  $\int_{-1}^1 \frac{1}{k^2 + k'^2 - 2kk'x} dx = \frac{1}{kk'} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right|$
- Ein Weg führt über die Zerlegung des Coulombpotentials in Fourierkomponenten  $V(\mathbf{s}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} V_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{s}}$ . Für  $V(\mathbf{s}) = \frac{1}{|\mathbf{s}|}$  erhält man  $V_q = \frac{4\pi}{q^2}$  wenn  $q \neq 0$  und  $V_0 = \int_V d^3s \frac{1}{|\mathbf{s}|}$  wenn  $q = 0$ .

**Vorlesung:** Di. um 8:30 Uhr – 10:00 Uhr in EW 203,  
Do. um 8:30 Uhr – 10:00 Uhr in EW 203.

**Scheinkriterien:**

- Mindestens 50% der schriftlichen Übungspunkte.
- Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Tutorien (u.a. mindestens einmal vorrechnen).

**Sprechzeiten:**

Name	Tag	Zeit	Raum	Tel.
Prof. Dr. Harald Engel	Mi	14:30 – 16:00 Uhr	EW 738	79462
Mathias Hayn		nach Vereinbarung	EW 711	27884
Wassilij Kopylov		nach Vereinbarung	EW 705	26143
Jan Totz		nach Vereinbarung	EW 627	27681