Prof. Dr. Dr. h.c. Eckehard Schöll, PhD
MSc. Rico Berner, Dr. Javier Cerrillo, Dr. Benjamin Lingnau

4. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Mo. 20.11.2017 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude

Aufgabe 9 (9 Punkte): *Unterscheidbare und ununterscheidbare Teilchen*

Betrachten Sie die Wellenfunktion eines Zwei-Teilchenzustands $\psi_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

(a) Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für unterscheidbare und ununterscheidbare Teilchen in diesem Zustand.

(b) Diskutieren Sie das Ergebnis aus a) für ununterscheidbare Teilchen unter der Annahme, dass $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$ gilt.

(c) 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-Näherung*

Betrachten 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:

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

(b) Nehmen Sie für die Einteilchen-Wellenfunktionen in Gl. (1) ebene Wellen $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{kr}}$ 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.

(c) 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!

Scheinkriterien:

- Mindestens 50% der Übungspunkte (Abgabe in 3er Gruppen).
- Regelmäßige, aktive Teilnahme an den Tutorien.
- Vorstellen einer Übungsaufgabe im Tutorium.
- Bearbeitung und Vorstellung eines Projektes.

	Mo	**Di**	**Mi**	**Do**	**Fr**
08-10		EW 203		EW 203	
10-12					EW 114
12-14		EW 229			
14-16					
16-18				EW 226	

Sprechstunden			
ES	Prof. Dr. Dr. h.c. Eckehard Schöll, PhD	nach Vereinbarung	EW 735
RB	MSc. Rico Berner	**Di 14-15**	ER 245
JC	Dr. Javier Cerrillo	**Do 13-14**	EW 705
BL	Dr. Benjamin Lingnau	**Mi 13-14**	EW 629