

Prof. Sabine Klapp

Dr. Alexander Carmele, Dr. Javier Cerrillo, Malte Selig

8. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II**Abgabe: Do. 20.12.2018 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude***Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.***Aufgabe 15 (20 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: $\varphi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\alpha \cdot \mathbf{r}}$. 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, d.h. bei $T = 0$. 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 $n = \frac{N}{V}$ die Elektronendichte im Volumen V sei.
 - (b) Bestimmen Sie die kinetische Energie ε_α^0 eines freien Elektrons (also ohne Betrachtung der Coulombanteile) im Zustand $\alpha = (\mathbf{k}, m_s)$.
2. Im sogenannten Jellium-Modell wird ein konstantes, gleichmäßig verteiltes Kernpotential angenommen: $V_{\text{Kern}}(\mathbf{r}) = -V_0$ mit $V_0 = n \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} V_{q=0}$. Berechnen Sie die Hartree-Fock Energien ε_α für dieses Modell in dem Sie die ebenen Wellen φ_α einsetzen. 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 $-V_0$ aufgehoben wird. Bestimmen Sie dann den Austauschterm. Aufwendige Integrale können mit Mathematica bestimmt werden und nutzen Sie die Fourier-Darstellung des Coulombpotentials.

3. Geben Sie die mittlere kinetische Energie und mittlere Austauschenergie im gesamten System an.
4. Diskutieren Sie unter Verwendung des Ergebnisses für die gesamte mittlere Energie, warum sich ein Bindungszustand für eine bestimmte Elektronendichte einstellt.