Technische Universität Berlin Institut für Theoretische Physik Prof. Dr. Eckehard Schöll, PhD. Dr. Frank Elsholz

SS 2006

4. Übungsblatt

Theoretische Festkörperphysik I

Aufgabe 9 Besetzungszahldarstellung für Bosonen

(10 Punkte)

In einem eindimensionalen Kasten der Kantenlänge L=1 nm (in z-Richtung) mit unendlich hohen Potentialwänden am Rand sollen sich He⁴-Atome befinden.

- a) Geben Sie die Einteilchen-Energieeigenwerte und -funktionen (normiert!) an. Diese Zustände werden im folgenden mit Teilchen besetzt.
- **b**) Es mögen sich nun drei He⁴-Atome im Kasten befinden. Geben Sie die symmetrisierte Gesamtwellenfunktion an, wenn sich ein Teilchen im Grundzustand und zwei Teilchen im ersten angeregten Zustand befinden.
- c) Geben Sie den Hamiltonoperator in der Teilchenzahldarstellung an, wenn zusätzlich das Gravitationspotential $V_q(z) = mgz$ auf die Teilchen wirkt.
- d) Nun soll zusätzlich noch die abstoßende Wechselwirkung zwischen den Atomen durch das Wechselwirkungspotential $V_w(z_1, z_2) = A\delta(z_1 z_2)$ berücksichtigt werden. Wie lautet der Gesamthamiltonoperator in der Teilchenzahldarstellung?
- e) Berechnen Sie den Erwartungswert der Energie des Gesamthamiltonoperators aus d) für die Konfiguration aus b).

Hinweis: Bei c) und d) wird die explizite Berechnung der auftretenden Integrale nicht erfordert. Allerdings bei Teil e).

Die Gittersumme A_n^{kristall} eines Kristallgitters wird folgendermaßen definiert:

$$A_n^{\text{kristall}} \equiv \sum_{\mathbf{R}_I \in \text{kristallgitter}} \alpha_{\mathbf{R}_I}^{-n}$$

Dabei ist die dimensionslose Größe $\alpha_{\mathbf{R}_I}$ die Proportionalitätskonstante zwischen der Länge von \mathbf{R}_I und dem Abstand c zwischen nächsten Nachbarn:

$$|\mathbf{R}_I| = \alpha_{\mathbf{R}_I} \cdot c$$

Berechnen Sie Näherungswerte der Gittersummen A_6 und A_{12} in der kubisch flächenzentrierten (fcc), kubisch raumzentrierten (bcc) und der kubischen (sc) Kristallstruktur für Gittervektoren bis zur Ordnung

- a) nächste Nachbarn,
- b) übernächste Nachbarn
- c) überübernächste Nachbarn

Vergleichen Sie die Näherungswerte mit Literaturangaben. Hinweis: Die Zuhilfenahme eines Mathematikalgebraprogramms (Mathematica, Maple, etc.) ist möglich.

Bemerkung: A_6 und A_{12} sind relevant für die Berechnung der Energie von Edelgaskristallen.

Ausgabe: 9. Mai 2006

Abgabe: 19. Mai 2006

WWW-Seite: http://wwwitp.physik.tu-berlin.de/lehre/TFP/

Scheinkriterien: Einmal Vorrechnen in den Übungen und eine erfolgreiche Rücksprache. *und* 60 % der erreichbaren Punkte in den Übungsaufgaben (Abgabe in Dreiergruppen!)

Sprechstunden: Schöll: Mi 14:30 - 15:30 Uhr PN 735, Elsholz: Di. 14 - 15 Uhr PN 629