Prof. Sabine Klapp
Dr. Alexander Carmele, Dr. Malte Selig, Arne Zantop

8. Übungsblatt – Quantenmechanik II

Abgabe: Do. 19.12.2019 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 $V_{\mathsf{Kern}}(\mathbf{r})$ vorgestellt:

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

Es seien nun ebene Wellen wie folgt definiert: $\varphi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}}$. 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 Coulombwechselwirkung im Grundzustand, d.h. bei $T = 0$. Welche Zustände sind besetzt? Warum existiert eine Fermikante mit $|\mathbf{k}| < k_F$?

   (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^0_α eines freien Elektrons (also ohne Betrachtung der Coulombanteile) im Zustand $\alpha = (\mathbf{k}_\alpha, m_{s_\alpha})$.

2. Im sogenannten Jellium-Modell wird ein konstantes, gleichmäßig verteiltes Kernpotential angenommen: $V_{\mathsf{Kern}}(\mathbf{r}) = -V_0$ 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, indem Sie den Ebenen-Wellen-Ansatz φ_α einsetzen. Man erhält:

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

   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.

Vorlesung:
Di. um 8:15 Uhr – 9:45 Uhr in EW 203,
Do. um 8:15 Uhr – 9:45 Uhr in EW 203.

Sprechzeiten:

Prof. Sabine Klapp	Di.	13:15 - 14:00	in EW 707
Dr. Alexander Carmele	Di.	13:00 - 14:00	in EW 704
Dr. Malte Selig	Mo.	13:00 - 14:00	in ER 238
Arne Zantop	Fr.	14:00 - 15:00	in EW 701

Scheinkriterien:

- Mindestens 50% der schriftlichen Übungspunkte.
- Regelmäßige und **aktive** Teilnahme in den Übungen.

Literatur zur Lehrveranstaltung:

- W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1,2: Quantenmechanik (Springer)
- U. Scherz, Quantenmechanik (Teubner)
- F. Schwabl, Quantenmechanik für Fortgeschrittene (Springer)
- E. Fick, Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie (Aula-Verlag)
- W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 7: Vielteilchentheorie (Springer)