Theoretische Physik V
- Quantenmechanik II (WS 2015/2016) -

Übungsblatt 2

Ausgabe 10.11.15 – Abgabe 19.11.15– Besprechung 20.11.15

▷ Aufgabe 1

Schätzen Sie die Grundzustandsenergie von Helium mit dem Ritz'schen Variationsverfahren nach oben ab. Als Variationsfunktion zum Variationsparameter α verwende man $\Phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \alpha) = \phi(\vec{x}_1; \alpha)\phi(\vec{x}_2; \alpha)$ mit der Einteilchenfunktion $\phi(\vec{x}; \alpha) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/2}} e^{-\alpha r}$. Was ist die physikalische Bedeutung von α?

▷ Aufgabe 2

Bestimmen Sie die Elektronenkonfiguration des Grundzustandes von Kohlenstoff und ihre Spektralterme. Unter Berücksichtigung der Restwechselwirkung – was ist der Grundzustandsterm gemäß Hund'schen Regeln?

▷ Aufgabe 3 (Bindungsenergie von Metallen)

Das sieht jetzt lang aus ... ist aber nicht ganz so schlimm, da das meiste sowieso nur erläuternder Text ...

Ein Stück Metall, aber auch ein Plasma, wird gerne als wechselwirkende Elektronengas beschrieben, das sich vor einem gleichförmig verteilten positiven Hintergrund befindet, wobei der Hintergrund so beschaffen ist, dass das Gesamtsystem elektrisch neutral ist. Vernachlässigt wird dabei, dass die positiven Ladungen in Wirklichkeit in den Ionenrümpfen lokalisiert sind, und dass deren Dynamik im Prinzip auch zu berücksichtigen ist. Allerdings sind die Ionenrümpfe i.A. viel schwerer als die Elektronen, so dass deren Bewegung in der Tat guten Gewissens vernachlässigt werden kann. Die Annahme der gleichförmig verschmierten positiven Hintergrundladung ist etwas dramatischer; das hier vorgestellt Modell vermittelt daher einen eher qualitativen Einblick in die Physik von Metallen.

Wir interessieren uns für die Eigenschaften im Inneren des Metalls (engl. *bulk*). Wir nehmen an, dass das System würfelförmig mit Seitenlängen L; der Limes $L \to \infty$ wird am Ende vollzogen. Im unendlich ausgedehnten, homogenen System sind alle physikalischen Eigenschaften invariant unter räumlichen Translationen. Wir dürfen die "Box"-Randbedingungen daher getrost durch periodische Randbedingungen für die Einteilchenwellenfunktionen ersetzen. Eine den Randbedingungen und Symmetrien angepasste Basis von Einteilchenwellenfunktionen sind dann ebene Wellen

$$\varphi_{\vec{k}\sigma}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \underline{\chi}_\sigma \tag{3}$$

wo $V = L^3$ das Volumen des Quantisierungswürfels, die erlaubten Wellenvektoren durch die periodischen Randbedingungen bestimmt,

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}\,, \qquad i = X, Y, Z\,, \qquad n_i = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots\,, \tag{4}$$

und $\underline{\chi}_\sigma$ Paulispinoren für die Spin-Polarisationszustände "rauf" und "runter" bezüglich einer irgendwie gewählten Z-Richtung,

$$\underline{\chi}_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \underline{\chi}_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

In Erinnerung an die Elektrodynamik-Vorlesungen lässt sich der Hamiltonoperator des Gesamtsystems, bestehend aus N Elektronen und dem positiven Hintergrund, nun schreiben

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{el}} + \hat{H}_{\mathrm{b}} + \hat{H}_{\mathrm{el-b}} \tag{6}$$

wo

$$\hat{H}_{\mathrm{el}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j}^{N} \frac{e^{-\mu|\hat{\vec{r}}_i - \hat{\vec{r}}_j|}}{|\hat{\vec{r}}_i - \hat{\vec{r}}_j|}, \tag{7}$$

der Hamiltonoperator der Elektronen,

$$\hat{H}_{\mathrm{b}} = \frac{1}{2} e^2 \iint \frac{\varrho(\vec{x})\varrho(\vec{x}')e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} d^3x d^3x' \tag{8}$$

der Hamiltonoperator des positiven Hintergrunds mit Ladungsdichte $\varrho = N/V$, und

$$\hat{H}_{\mathrm{el-b}} = -e^2 \sum_{i=1}^{N} \int \frac{\varrho(\vec{x}) e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{r}}_i|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{r}}_i|} d^3x \tag{9}$$

die Wechselwirkungsenergie der Elektronen mit dem positiven Hintergrund.[1] Der hier eingeführte konvergenzerzeugende Faktor dient dazu, die Existenz der Integrale zu sichern; am Ende der Rechnung wird μ nach Null geschickt. Dabei wird allerdings zuerst der thermodynamische Limes $N \to \infty$, $V \to \infty$ mit $\varrho := N/V = const.$ vollzogen, und erst im Anschluss $\mu \to \infty$.[2]

(a) Berechnen Sie $\hat{H}_{\mathrm{b}}$, und bestätigen

$$\hat{H}_{\mathrm{b}} = \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \tag{10}$$

(b) Berechnen Sie $\hat{H}_{\mathrm{el-b}}$, und bestätigen

$$\hat{H}_{\mathrm{el-b}} = -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \tag{11}$$

<u>Hinweis:</u> Im Prinzip ist $\hat{H}_{\mathrm{el-b}}$ ein nichttrivialer Einteilchenoperator. Im vorliegenden Fall darf allerdings die Translationsinvarianz ausgeschlachtet werden ...

[1] In SI-Einheiten ist das hier verwendete e^2 zu ersetzen druch $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

[2] Äquivalent wird in jedem Schritt angenommen, dass $\mu^{-1} \ll L$. Mit dieser Annahme darf der Integrationsnullpunkt beliebig verschoben werden, weil Oberflächenkorrekturen in diesem Regime nichts beitragen.

Angesichts Ihrer in (a) und (b) gewonnenen Einsichten darf der Hamiltonoperator (6) reduziert werden

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} + \hat{H}_{\mathrm{el}}\,. \tag{12}$$

Der Hamiltonoperator der Elektronen ist die Summe aus kinetischer Energie $\hat{T}$ und potentieller Energie der Coulombwechselwirkung $\hat{V}$.

(c) Bestimmen Sie den Operator der kinetische Energie in zweiter Quantisierung, und bestätigen

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}\,, \tag{13}$$

wo $\hat{a}_{\vec{k}\sigma}$ fermionischer Teilchenvernichtungsoperator. Interpretieren Sie Ihren Befund als "kinetische Energie jeder Mode mutlipliziert mit der Besetzungszahl der Mode".

(d) Bestimmen Sie die potentielle Energie der Coulombwechselwirkung der Elektronen in zweiter Quantisierung, und bestätigen

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\frac{4\pi}{q^2+\mu^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}\hat{a}_{\vec{p}\sigma_2}\hat{a}_{\vec{k}\sigma_1}\,. \tag{14}$$

Die Größe $\hbar\vec{q}$ firmiert auch unter dem Begriff "Impulsübertrag". Wüssten Sie, warum?

(e) Bestimmen Sie den $\vec{q} = 0$-Beitrag $\hat{V}$, vergleichen Ihn mit dem c-Zahl Beitrag in (12), und bestätigen Sie schließlich für den thermodynamischen Limes

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}{}'\sum_{\sigma_1\sigma_2}\frac{4\pi}{q^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}\hat{a}_{\vec{p}\sigma_2}\hat{a}_{\vec{k}\sigma_1}\,. \tag{15}$$

wobei $\sum'$ bedeutet, dass der $\vec{q} = 0$-Term ausgeschlossen ist. Bewundern Sie Ihr Resultat: alle potentiell problematischen c-Zahl Anteile sind verschwunden!

An dieser Stelle ist es nun angebracht, dimensionslose Größen einzuführen. Das System wird von zwei Längenskalen regiert: dem mittleren Teilchenabstand r_0, eingeführt über das spezifische Volumen (Volumen pro Teilchen)

$$V = \frac{4\pi}{3}r_0^3 N\,, \tag{16}$$

und den Bohrschen Radius, der durch die Coulombwechselwirkung definiert ist

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\,. \tag{17}$$

Das dimensionslose Verähltnis dieser beiden Längenskalen,

$$r_{\mathrm{s}} := \frac{r_0}{a_0} \tag{18}$$

vermittelt offensichtlich ein Mass für die Dichte des Systems.

(f) Führen Sie dimensionslose Größen ein,

$$\bar{V} := \frac{V}{r_0^3}\,, \quad \bar{\vec{k}} := r_0\vec{k}\,, \quad \bar{\vec{p}} := r_0\vec{p}\,, \quad \bar{\vec{q}} := r_0\vec{q}\,, \tag{19}$$

und überzeugen Sie sich, dass (15) in dimensionsloser Form geschrieben wird

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_\mathrm{s}^2}\left[\sum_{\bar{\vec{k}}\sigma}\frac{\hbar^2\bar{\vec{k}}^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\bar{\vec{k}}\sigma}\hat{a}_{\bar{\vec{k}}\sigma} + \frac{r_\mathrm{s}}{2\bar{V}}{\sum_{\bar{\vec{k}}\bar{\vec{p}}\bar{\vec{q}}}}'\sum_{\sigma_1\sigma_2}\frac{4\pi}{\bar{q}^2}\hat{a}^\dagger_{\bar{\vec{k}}+\bar{\vec{q}},\sigma_1}\hat{a}^\dagger_{\bar{\vec{p}}-\bar{\vec{q}},\sigma_2}\hat{a}_{\bar{\vec{p}}\sigma_2}\hat{a}_{\bar{\vec{k}}\sigma_1}\right]. \tag{20}$$

Die Gestalt (20) offenbart eine wichtiges Resultat: im Regime hoher Dichte, $r_\mathrm{s} \to 0$, ist die potentielle Energie der Coulombwechselwirkung in fermionischen Systemen lediglich eine kleine Störung! Für genügend dichte Systeme ist das Ideale Fermigas – trotz der brutalen Coulombwechselwirkung – eine hervorragende Näherung, und Effekte der Wechselwirkung können gut und gerne in erster Ordnung Störungstheorie bestimmt werden!

(g) Zeigen Sie, dass die Grundzustandsenergie pro Elektron im Limes hoher DIchte

$$\frac{E_0}{N} = \frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{2.21}{r_\mathrm{s}^2} - \frac{0.916}{r_\mathrm{s}} + \cdots\right]. \tag{21}$$

in führender Ordnung (= erste Ordnung) Störungstheorie. Plotten Sie E_0/N als Funktion von r_s. Bestätigen Sie, dass diese Funktion bei $r_\mathrm{s} = 4.83$, $E_0/N = -1.29\mathrm{eV}$ ein Minimun aufweist. Vergleichen Sie diese Werte mit den Werten von Natrium unter Laborbedingungen $r_\mathrm{s}^\mathrm{Na} = 3.96$, $(E_0/N)^\mathrm{Na} = -1.13\mathrm{eV}$ und erfreuen sich an der schönen Übereinstimmung.

Der erste Term in (21) ist nichts anderes als die kinetische Energie des idealen Fermigases, der zweite Term das Resultat der ersten Ordnung Störungstheorie (philosophieren Sie mal über das negative Vorzeichen), die weiteren Terme, die hier mit $\cdots$ angedeutet sind laufen unter dem Begriff "Korrelationsenergie". In Spezialvorlesungen lernen Sie diese zu berechnen.