

## Aufgabe 24: „Austauschkorrelationen von freien Teilchen“

a) Zwei identische Fermionen / Bosonen bewegen sich kräftefrei entlang der  $x$ -Achse mit Impulsen  $p_1$  und  $p_2$

b) ... in einem eindimensionalen Kasten mit undurchdringlichen Wänden bei  $\pm L/2$

c) Die total antisymmetrische / symmetrische 2-Teilchen Wellenfunktion  $\Psi(x_1, x_2)$  kann folgendermaßen geschrieben werden:

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \langle x_1 | p_1 \rangle \langle x_2 | p_2 \rangle \mp \langle x_2 | p_1 \rangle \langle x_1 | p_2 \rangle \right) \quad \begin{array}{l} \text{Fermionen} \\ \text{Bosonen} \end{array}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{\frac{i}{\hbar}(x_1 p_1 + x_2 p_2)} \mp e^{\frac{i}{\hbar}(x_2 p_1 + x_1 p_2)} \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{i}{\hbar}(x_1 p_1 + x_2 p_2)} \left( 1 \mp e^{-\frac{i}{\hbar}(p_1 - p_2)(x_1 - x_2)} \right)$$

d.h. der absolute Betrag  $|\Psi(x_1, x_2)|_{\text{Fermi.}} = \sqrt{2} \left| \sin \frac{(p_1 - p_2)(x_1 - x_2)}{2\hbar} \right|$

$$|\Psi(x_1, x_2)|_{\text{Boson.}} = \sqrt{2} \left| \cos \frac{(p_1 - p_2)(x_1 - x_2)}{2\hbar} \right|$$

Wenn also die Teilchen ungefähr gleiche Impulse haben ( $p_1 \approx p_2$ ) oder sich ungefähr am gleichen Ort aufhalten ( $x_1 \approx x_2$ ) wird die Amplitude klein / groß für Fermionen / Bosonen.

b) Aus der VL zur Quantenmechanik I wissen wir, dass der Einteilchen - Grundzustand für das eindimensionale - Kasten Problem mit unendlich hohen Wänden der folgende ist:

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi}{2L}x\right) ; \text{ der erste angeregte Zustand ist}$$

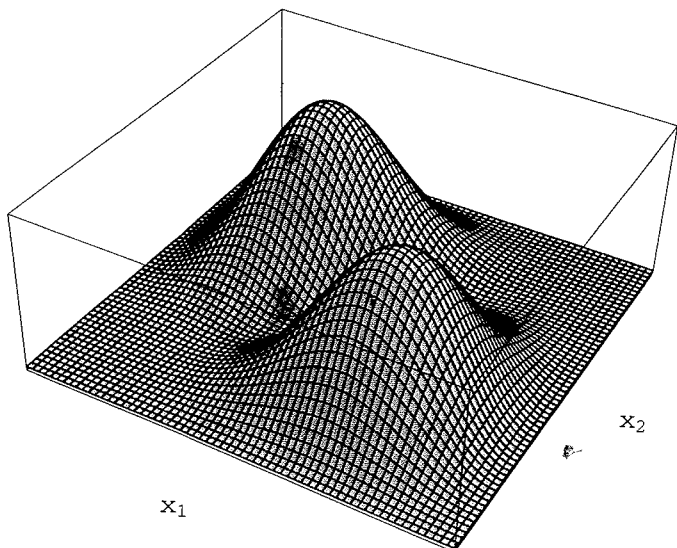
$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(2\frac{\pi}{L}x\right)$$

↳ damit ergibt sich die Zwei-Teilchen-Wellenfkt. für Fermionen/ Bosonen (in der je ein Teilchen  $\psi_0$  bzw.  $\psi_1$  besetzt) zu

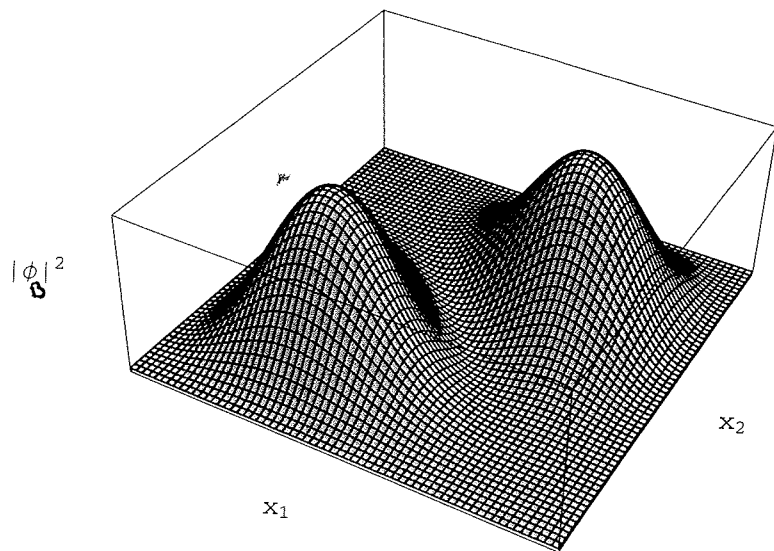
$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) &= \frac{\sqrt{2}}{L} \left( \cos\left(\frac{\pi}{L}x_1\right) \sin\left(2\frac{\pi}{L}x_2\right) \mp \cos\left(\frac{\pi}{L}x_2\right) \sin\left(2\frac{\pi}{L}x_1\right) \right) & \text{F} \\ &= 2 \frac{\sqrt{2}}{L} \cos\left(\frac{\pi}{L}x_1\right) \cos\left(\frac{\pi}{L}x_2\right) \left( \sin\left(\frac{\pi}{L}x_2\right) \mp \sin\left(\frac{\pi}{L}x_1\right) \right) & \text{B} \end{aligned}$$

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 :$$

Fermionen



Bosonen



Sieht man sich die Plots von  $|f(x_1, x_2)|^2$  an, so sieht man, dass im Fall der Fermionen die Maxima auf der Linie  $x_1 = -x_2$  liegen und die Nullstellen auf  $x_1 = x_2$  ~ bei den Bosonen ist es genau umgekehrt.

D.h. Fermionen befinden sich vorzugsweise getrennt in den beiden Hälften des Kastens Bosonen vorzugsweise vereint.

⇒ Symmetriekorrelationen  $\hat{=}$  effektive <sup>Ferme</sup> Abstoßung / <sup>Bosone</sup> Anziehung

○ Zahlenwerte der Wahrscheinlichkeit beide Teilchen gleichzeitig in derselben Hälfte vorzufinden:

$$2 \int_0^{\frac{L}{2}} |f(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 \begin{cases} 0.14 & \text{Fermionen} \\ 0.86 & \text{Bosonen} \end{cases}$$

→ Wahrscheinlichkeit <sup>dichte</sup> ein Teilchen am Ort  $x$  zu finden ist

$$2 \int |f(x_1, x_2)|^2 dx_2 = \frac{1}{L} \left( 1 + 4 \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) \right) \cos^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$

(gleich für Fermionen / Bosonen)

## Aufgabe 25 "Korrelierte und unkorrelierte Zustände"

In Aufgabe 22 des 8ten Übungsblattes wurden die Eigenzustände eines zwei Elektronensystems formuliert. Die voll antisymmetrischen Zustände wurden zunächst für zwei unabhängige Elektronen aufgeschrieben, deren gesamter Hamilton Operator  $H_0 = h_0(1) + h_0(2)$  ist. Dies konnte man mit den sog. Slater-Determinanten machen.

Man hat jedoch gesehen, dass die resultierenden Zustände nicht mehr unbedingt Eigenzustände eines Hamilton Operators mit Wechselwirkungsbeitrag  $V = -J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$  sind, d.h. in der Basis von  $H_0 = h_0(1) + h_0(2)$  ist der Gesamtspin keine gute Quantenzahl. Deswegen wurden die Eigenzustände von  $H_0$  gemischt (jedenfalls teilweise)

Zwei Beispiele:

i) der "Singlett-Zustand"  $\frac{1}{\sqrt{2}} |e_0\rangle |e_0\rangle (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

Slater-Det.  $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |e_0\uparrow\rangle_1 & |e_0\uparrow\rangle_2 \\ |e_0\downarrow\rangle_1 & |e_0\downarrow\rangle_2 \end{vmatrix}$

hat einen gut definierten Gesamtspin von  $S=0$  und ist somit sowohl Eigenzustand von  $H_0$  als auch von  $H_1 = H_0 + V$

ABER

ii)  $\frac{1}{\sqrt{2}} |e_1\uparrow\rangle |e_0\downarrow\rangle - |e_0\downarrow\rangle |e_1\uparrow\rangle$

$\frac{1}{\sqrt{2}} |e_1\downarrow\rangle |e_0\uparrow\rangle - |e_0\uparrow\rangle |e_1\downarrow\rangle$

Beide Zustände sind Slater Determinanten und Eigenzustände von  $H_0$

ABER weil der Gesamtspin für die Zustände jeweils NICHT gut definiert ist, sind erst Linearkombinationen der Zustände auch Eigenzustände von  $H_1 = H_0 + V$

## Eigenzustände von $H_1$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} |e_1 \uparrow\rangle |e_0 \downarrow\rangle - |e_0 \downarrow\rangle |e_1 \uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} |e_1 \downarrow\rangle |e_0 \uparrow\rangle - |e_0 \uparrow\rangle |e_1 \downarrow\rangle \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & (|e_1\rangle |e_0\rangle - |e_0\rangle |e_1\rangle) (\uparrow \downarrow + \downarrow \uparrow) \\ & (|e_1\rangle |e_0\rangle - |e_0\rangle |e_1\rangle) (\uparrow \downarrow - \downarrow \uparrow) \end{aligned}$$

Man kann sofort sehen, dass die Eigenzustände von  $H_1$  (rechte Seite) aber NICHT mehr als einfache Slater-Deter. geschrieben werden kann.

Fazit: Wechselwirkungsbeiträge wie  $V$ , die ihren Ursprung z.B. in der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen haben verkomplizieren die Eigenbasis der Vielteilchen-Systeme, die nicht mehr als einfache Slater-Det. geschrieben werden können.

## Aufgabe 26 "II. Quantisierung: Ein-/Zweitellen-Operatoren"

a) kinetische Energie (Herleitung der allgemeinen Formel

$$\hat{H}_{kin} = \sum_{h, h'} \langle h | \frac{\hbar^2 k^2}{2m} | h' \rangle c_h^\dagger c_{h'} \quad \text{im Prof. Held's Skriptum, Kap. 7, S. 20-25)$$

berechne Matrixelemente

$$\langle h | \frac{\hbar^2 k^2}{2m} | h' \rangle = \int_V d^3 r e^{-i h r} \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_i)^2 e^{i h' r}$$

$$= \frac{\hbar^2 \hbar'^2}{2m} \underbrace{\int_V d^3 r e^{-i(h-h')r}}_{\delta_{h,h'}} = \frac{\hbar^2 \hbar'^2}{2m} \delta_{h,h'}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H}_{kin} = \sum_h \frac{\hbar^2 \hbar^2}{2m} c_h^\dagger c_h}$$

Für den Spinoperator sind die Matrixelemente einfach durch die Pauli-Matrizen gegeben:

$$(S_i)_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{2} (\sigma_i)_{\alpha\alpha'}$$

$$\text{mit } \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

damit schreibt sich der Einteilchen-Spinoperator in zweiter Quantisierung wie folgt:

$$\hat{S} = \sum_{\lambda} S_{\alpha\alpha'} c_{\lambda\alpha}^\dagger c_{\lambda\alpha'}$$

(wobei  $\lambda$  für den Satz der restlichen Quantenzahlen steht)

b) Für die Berechnung des Matrixelements der Coulombwechselwirkung benötigen wir die Fouriertransformierte von  $U(r-r')$

$$U(r_1 - r_2) = \sum_q e^{iq(r_1 - r_2)} \Rightarrow U_q = \frac{1}{V} \int d^3r V(r) e^{-iqr}$$

damit:

$$\langle h_1, h_2 | U(r_1 - r_2) | h'_1, h'_2 \rangle$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 e^{-ih_1 r_1} e^{-ih_2 r_2} U(r_1 - r_2) e^{ih'_1 r_1} e^{ih'_2 r_2}$$

$$= \sum_q V_q \underbrace{\frac{1}{V} \int d^3r_1 e^{-i(h_1 - h'_1 - q)r_1}}_{\delta_{h_1, h'_1 + q}} \underbrace{\frac{1}{V} \int d^3r_2 e^{-i(h_2 - h'_2 + q)r_2}}_{\delta_{h_2, h'_2 - q}}$$

$$= \sum_q V_q \delta_{h_1 - q, h'_1} \delta_{h_2 + q, h'_2}$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{h_1, h_2} \sum_q V_q c_{h_1}^\dagger c_{h_2}^\dagger c_{h_2 + q} c_{h_1 - q}$$

## Aufgabe 2 "Jellium Modell in II. Quantisierung"

a) Mit den Ergebnissen von Aufgaben 26 a) & 26 b) kann der Hamilton-Operator sehr einfach umgeschrieben werden

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(|r_i - r_j|) \quad \text{mit } U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

↳ in II. Quantisierung:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1}$$

wobei  $V_{\mathbf{q}} = \frac{e^2}{V \epsilon_0 q^2}$  die Fouriertransformierte der Coulomb-Wechselwirkung ist.

b) Sei  $V(r) = 0$ , dann suchen wir nach  $E_0 = \langle \text{gs} | H_{\text{kin}} | \text{gs} \rangle$   
↑  
Grundzustand

$$\Rightarrow E_0 = 2 \langle \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \langle \underbrace{c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}}_{\hat{n}_{\mathbf{k}}} \rangle$$

↑  
Spin

(Dichte-Operator)

Im Grundzustand wird nun alles bis zum Fermi-Impuls besetzt sein, d.h.  $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \begin{cases} 1 & \text{für } \mathbf{k} \leq k_F \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

$$\Rightarrow E_0 = 2 \sum_{\mathbf{k} \leq k_F} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

wir können nun die Summe umschreiben in ein Integral

$$\Rightarrow E_0 = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} d\mathbf{k} = \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m\pi^2} \cdot V$$



mit der Dispersionsrelation für das freie Elektronengas  
gilt  $N = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V \Rightarrow n = \frac{N}{V}$

mit der Dichte  $n$  wird häufig auch der dimensionslose Parameter  
 $r_s = \left(\frac{4}{3}\pi n\right)^{-\frac{1}{3}}$  eingeführt, so dass  $k_F = \frac{(9\pi/4)^{\frac{1}{2}}}{r_s} = \frac{1.92}{r_s}$

$$\Rightarrow \text{damit ist } E_0 = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10 m \pi^2} = \frac{3.63}{r_s/a_0} \text{ \AA}^{-1} \quad (a_0 \text{ bohr-radius})$$

$$= \frac{\hbar^2 k_F^2}{10 m} \frac{3 N}{\pi^2} = \frac{(3.63)^2 \cdot \hbar^2 \cdot 3 a_0^2}{10 m} \frac{N}{r_s^2}$$

$$= \frac{(3.63)^2 \cdot 3 \cdot R_y}{5} \frac{N}{r_s^2}$$

$$\approx \underline{\underline{7.9 R_y \cdot \frac{N}{r_s^2}}}$$

c) Die Energiekorrektur in erster Ordnung lautet

$$\sum_{l_1, l_2} \sum_{q \neq 0} V_q \langle g_s | c_{l_1+q}^\dagger c_{l_2-q}^\dagger c_{l_2} c_{l_1} | g_s \rangle$$

damit ein solcher Beitrag nicht verschwindet müssen in den  
gleichen Zuständen Teilchen vernichtet und erzeugt werden.

Also mit  $q \neq 0$  heißt das  $l_1+q = l_2$  und  $l_2-q = l_1$

$$\hookrightarrow \langle g_s | c_{l_2}^\dagger c_{l_1}^\dagger c_{l_2} c_{l_1} | g_s \rangle = \begin{cases} -c & \text{wenn } l_1 \text{ und } l_2 \text{ besetzt} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\Rightarrow$  Das bedeutet, dass die Wechselwirkung die Grundzustands-  
energie tatsächlich erniedrigt!