Technische Universität
Wien

Prof. Dr. K. Held
Dr. A. Toschi

9. Übung zur Quantenmechanik II

Sommersemester 2009

ABGABE: **Freitag**, **19.06.2009**, zu Beginn der Übungstunde(Tutorium). Bemerkung: Keine Übungstunde am Fr. 12.06.09.

24. Austauschkorrelationen von freien Teilchen *2+2=4 Punkte*

Zwei identische Bosonen (Fermionen) bewegen sich kräftefrei

a) mit Impulsen p_1, p_2 entlang der $x-$Achse $(-\infty < x < \infty)$,

b) in einem eindimensionalen Kasten mit undurchdringlichen Wänden bei $\pm\frac{L}{2}$. Die Teiclchen sollen die beiden energieärmesten Einteilchen-Zustände besetzen (Grundzustand und erster angeregter Zustand).

Berechne die total symmetrische (antisymmetrische) 2−Teilchen Wellefunktion $\psi(x_1, x_2)$ für beide Fälle. Wie hängt im Fall **a)** deren Amplitude von $p_1 - p_2$ und $x_1 - x_2$ ab? Für den endlichen Kasten **b)**, wie groß ist jeweils die Wahrscheinlichkeit dafür, beide Teilchen in derselben Hälfte des Kastens anzutreffen? Und die Wahrscheinlichkeit darfür, eines der Teilchen an der Stelle x (ohne Berücksichtigung der Position des zweiten Teilchen) zu finden?

Bemerkung : Man beachte diese Austauschkorrelationen beruhen lediglich auf der Antisymmetrie/Symmetrie der Wellefunktion, nicht auf Wechselwirkung-Effekten (d.h. echten "Korrelationen").

25. Korrelierte und unkorrelierte Zustände^v *2 Punkte*

Um besser die echte Beudetung des Wortes *Korrelation* zu verstehen, betrachte wieder die Eigenzustande des Zwei-Elektronen Systems berechnet in Beispiel **22 a)** und **22 b)** des 8. Übungsblatts (mit und ohne Wechselwirkung).
Versuche alle Eigenzustände als Slater Determinante (d.h., eine antisimmetrisierte Summe der Produkte der Einteilchenzustände $\psi_N(E_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_n \epsilon_n (\Pi_i \ \psi_{\mathrm{e}_i, \sigma_i})$, mit e_i Eigenwert von $h(i)$ und $\sigma_i = \uparrow, \downarrow$) zu schreiben. Ist dies (oder ist dies nicht) immer möglich? Warum?

26. II Quantisierung: Ein/Zweiteilchen-Operatoren[v] *1+2=3 Punkte*

Ein Einteilchen-Operator A_{1T} ist ein Operator, der auf den Hilbertraum $\mathcal{H}$ der einzelnen Teilchen wirkt. Wenn mann den Hilbertraum $\mathcal{H}_N$ für N identische Teilchen betrachtet, muss die Wirkung dieses Operators auf jedes Teilchen dieselbe sein,

$$A = \sum_{k=1}^{N} A_k \;\; \text{mit} \;\; A_k(|\phi_1\rangle ... |\phi_k\rangle ... |\phi_N\rangle) = |\phi_1\rangle ... (A_{1T}|\phi_k\rangle) ... |\phi_N\rangle.$$

a) Typische Beispiele der Einteilchen-Operatoren sind der Elektron Spin Operator $\vec{S}$, und der Operator der kinetische Energie $H_{kin} = \frac{P^2}{2m}$. Berechne den Ausdruck von $\vec{S}$ und H_{kin} im Fock-Raum, d.h., als Linerarkombination von Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren.

b) Sinngemäß ist die Wirkung eines Zweiteichen-Operators A_{2T} im Hilbertrraum $\mathcal{H}_N$ die folgende

$$A = \sum_{kj} A_{k,j} \;\; \text{mit} \;\; A_{k,j}(|\phi_1\rangle ... |\phi_k\rangle ... |\phi_j\rangle ... |\phi_N\rangle) = |\phi_1\rangle ... (A_{2T}|\phi_k\rangle ... |\phi_j\rangle) ... |\phi_N\rangle.$$

Typisches Beispiel in diesem Fall ist die Zwei-Teilchen Wechselwirkung mit $U_{jk} = U(|\vec{r}_k - \vec{r_j}|)$ $(k \neq j)$, wie in dem Fall der Coulomb Wechselwikung. Berechne den Ausdruck dieses Zweiteichen-Operators im Fock-Raum.

27. Jellium Modell in II Quantisierung *1+2+2=5 Punkte*

Im Jellium Modell betrachtet man ein Elektronengas

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

wobei $U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ das Coulomb-Potential ist, in einer homogenen positiven Hintergrundladung, die von den Ionen des Festkörpers erzeugt wird. Wegen der Hintergrundladung (deren Summe genau die gesamte negative Eletronenladung kompensiert) ist der sonst divergierende Beitrag der fouriertransformierten Coulomb Wechselwirkung (d.h. der $q = 0$ Beitrag) vernachlässigbar.

a) Schreibe den Ausdruck des Hamiltonians H des Jellium Modells im Fock-Raum (Hinweis: Für die Einteilchenbasis betrachte die ebene Welle)

b) Berechne die Grundzustandsenergie des Systems im Fall ohne Coulomb Wechselwirkung $V(r) = 0$, d.h, $E_0 = \langle E_0|H|E_0\rangle$.

c) Berechne in erster Ordung Störungtheorie in der Coulomb Wechselwirkung die Energiekorrektur zu E_0. Was ist der Effekt der Wechselwirkung im Jellium Modell?

v = vorlesungsrelevant