Theoretische Physik: Fortgeschrittene Quantentheorie, Übung 10

Prof. Dr. Alejandro Muramatsu WS 2014/15, 8. Januar 2015

1. Ideale Quantengase

Wir betrachten ein ideales Bosegas und ein ideales Fermigas, deren Verteilungsfunktionen gegeben sind durch

$$\langle n_B(\epsilon_k)\rangle = \frac{1}{\exp\left[\beta(\epsilon_k-\mu)\right]-1} \tag{1}$$

$$\langle n_F(\epsilon_k)\rangle = \frac{1}{\exp\left[\beta(\epsilon_k-\mu)\right]+1}. \tag{2}$$

a) Was sind die möglichen Werte des chemischen Potentials für Bosonen und Fermionen?

b) Wir betrachten nun den Limes hoher Temperaturen, indem sich die Systeme klassisch verhalten und $n_F \approx n_B$ gilt. Welche statistische Verteilung gilt in guter Näherung? Zeige für Bosonen und Fermionen bei fest vorgegebener Teilchendichte n das Verhalten von μ für $T \to \infty$.

2. Freies Elektronengas

Wir betrachten zu Beginn ein ideales nicht-wechselwirkendes N-Teilchen Fermigas in einem dreidimensionalen Kasten mit Volumen $V = L^3$ (Bevor wir in Aufgabe 2 das Jellium Modell betrachten). Dieses wird durch den Hamiltonoperator

$$H = \sum_{l=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_l^2}{2m}$$

beschrieben. Die Einteilchenlösungen haben die Form

$$\varphi_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(\boldsymbol{r},\, s\right) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \chi_\sigma\left(s\right).$$

Hierbei bezeichnet $\boldsymbol{k}$ den Wellenvektor, $\boldsymbol{r}$ die Ortskoordinate, χ die Spinfunktion, σ den Spin und s den Eigenwert des Spins. Wir fordern periodische Randbedingungen, d.h. $\varphi_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(\boldsymbol{r}+L\hat{\boldsymbol{e}}_i,\, s\right) = \varphi_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(\boldsymbol{r},\, s\right),\; i \in \{1,\, 2,\, 3\}$.

a) Verwende zunächst den Formalismus der ersten Quantisierung. Berechne explizit die Wellenfunktion des Grundzustandes für $N = 2$ und gebe dann den Grundzustand des N-Teilchensystems an. Berechne zudem die Dispersionsrelation $E\left(\boldsymbol{k}\right)$. Gebe eine Formel für die Grundzustandsenergie des N-Teilchensystems an (ohne Rechnung).

b) Im Grenzfall $V \to \infty$, $N/V = const$ darf man Summen über $\boldsymbol{k}$ durch Integrale ersetzen:

$$2\sum_{\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{k}) \to 2\frac{V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\, f(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}k\, D(k)\, f(k) = \int \mathrm{d}E\, D(E)\, f(k(E))\,.$$

Erkläre den Ursprung der Faktoren 2 und $\frac{V}{(2\pi)^3}$ vor dem ersten Integral. Die beiden hinteren Integrale dürfen verwendet werden, wenn der Integrand nur vom Betrag $|\boldsymbol{k}|$ abhängt. Berechne die Zustandsdichte

$$D(E) = 2\frac{V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\, \delta(E - E(\boldsymbol{k}))$$

unter Verwendung der Relation von Aufgabe 6.1. Stelle nun eine Beziehung zwischen der Teilchendichte $n = N/V$ und der Fermienergie her. Wie lautet die Grundzustandsenergie des Fermigases explizit.

Hinweis: Im Grundzustand des Fermigases nennt man die Energie zum höchsten besetzten Einteilchenzustand die Fermienergie $E_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2 k_\mathrm{F}^2}{2m}$.

c) Wir wechseln nun in in den Formalismus der zweiten Quantisierung und führen hierzu Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}$, $c_{\boldsymbol{k}\sigma}$ ein. Gebe den Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ des N-Teilchensystems in zweiter Quantisierung an. Wie sieht der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung aus? Verwende dabei

$$\frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3r\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}, \quad \sum_s \chi^*_\sigma(s)\,\chi_{\sigma'}(s) = \delta_{\sigma,\sigma'}.$$

3. Jellium-Modell

Ein sehr einfaches Modell zur Beschreibung eines Festkörpers ist das sogenannte Jellium-Modell. In diesem werden strukturelle Aspekte vernachlässigt und die positiv geladenen Atomrümpfe durch eine homogene Hintergrundladung ersetzt, um Ladungsneutralität zu garantieren. Die Elektronen werden als frei, d.h. nicht an Atome gebunden, betrachtet. Ihre Wechselwirkung ist durch die Coulomb-Wechselwirkung gegeben. Der vollständige Hamiltonoperator lautet

$$H_\mathrm{jell} = \sum_l \frac{\boldsymbol{p}_l^2}{2m} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{k,l,k\neq l}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_k - \boldsymbol{r}_l|} + H_+.$$

Verwende für diese Aufgabe die gegebenen Relationen und Ergebnisse aus Aufgabe 2.

a) Der sogenannte Jellium-Term H_+ ist ein konstanter Term und beschreibt die Summe aus der die Wechselwirkungsenergie eines homogenen Elektronengases mit der positiven Hintergrundladung sowie der Selbstenergie dieser positiven Hintergrundladung. Berechne diesen Term unter Verwendung der Fourierreihe des Coulomb-Potentiales

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \sum_{\boldsymbol{q}} v_{\boldsymbol{q}} e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')},\ v_{\boldsymbol{q}} = \frac{e^2}{\varepsilon_0 V \boldsymbol{q}^2}.$$

b) Wie lautet die Coulomb-Wechselwirkung in zweiter Quantisierung? Zeige, dass der Jellium-Term ein Divergieren der sich ergebenden Summe verhindert.

Zwischenergebnis:

$$H_{Jell} = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{q},\boldsymbol{k},\sigma,\sigma'} v_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}\sigma} c^\dagger_{\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}\sigma'} c_{\boldsymbol{q}\sigma'} c_{\boldsymbol{p}\sigma} - \frac{1}{2} v_{\boldsymbol{0}} N^2.$$

c) Berechne zum Schluss die Grundzustandsenergie in Hartree-Fock-Näherung, d.h. den Erwartungswert $\langle \Psi_0 | H_{\text{jell}} | \Psi_0 \rangle$. Verwende hierzu

$$\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}\neq\boldsymbol{p};|\boldsymbol{p}|,|\boldsymbol{q}|\leq k_{\text{F}}} \frac{e^2}{\varepsilon_0 V \left|\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p}\right|^2} = \frac{3}{16\pi^2\varepsilon_0} N e^2 k_F$$

Tipp: Welche Bedingungen an $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{q}$, σ und σ' müssen erfüllt sein, damit die Amplituden von Null verschieden sind?

4. Hochenergetische Fermionen

Bei der Behandlung hochenergetischer Fermionen sind relativistische Effekte zu berücksichtigen. Im folgenden behandeln wir ein ideales relativistisches Fermi-Gas indem wir für die Ein-Teilchen-Energien die relativistische Energie-Impuls Beziehung ansetzen

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}. \tag{3}$$

a) Zeige, dass für die mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle$ und die innere Energie U gilt

$$\langle N \rangle = (2S+1) \frac{m^3 c^3}{2\pi^2 \hbar^3} V \int_0^\infty \frac{\sinh^2 \boldsymbol{\alpha} \cosh \boldsymbol{\alpha}}{\exp(\beta[mc^2 \cosh \boldsymbol{\alpha} - \mu]) + 1} d\boldsymbol{\alpha} \tag{4}$$

$$U = (2S+1) \frac{m^4 c^5}{2\pi^2 \hbar^3} V \int_0^\infty \frac{\sinh^2 \boldsymbol{\alpha} \cosh^2 \boldsymbol{\alpha}}{\exp(\beta[mc^2 \cosh \boldsymbol{\alpha} - \mu]) + 1} d\boldsymbol{\alpha} \tag{5}$$

Hinweis: Benutze eine geeignete Substitution für p und beachte μ enthält nun die Ruhenergie mc^2.

b) Werte die Integrale für den Fall tiefer Temperaturen aus.