Übungen zur Quantenmechanik II – WS 2008/09 $\boxed{\text{H 2}}$

Abgabetermin: Donnerstag, 06.11.08

(4) Ideales Fermi-Gas in D Dimensionen **3 P.**

Betrachten Sie ein freies Elektronengas mit Dispersionsrelation $\varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2\vec{k}^2/2m$ in D Raumdimensionen. Bestimmen Sie für $T = 0$ die Spektraldichte $f_D(\varepsilon)$ in $dN/V = f_D(\varepsilon)\,d\varepsilon$ und daraus die Energiedichte E/V sowie den Druck p jeweils als Funktion der Anzahldichte n.
Hinweis: Das Volumen einer $(D-1)$-Sphäre lautet $\mathrm{Vol}(S_{D-1}) = 2\pi^{D/2}/\Gamma(D/2)$.

(5) Thomas–Fermi-Näherung **8 P.**

In der Thomas–Fermi-Näherung ist die Energie eines Gases von N Elektronen im Feld eines Atomkerns der Kernladungszahl Z durch das Minimum des Funktionals

$$E_{Z,N}[n] = \frac{3\gamma}{5}\int d^3r\; n^{5/3}(\vec{r}) - Ze^2\int d^3r\,\frac{n(\vec{r})}{r} + \frac{e^2}{2}\int d^3r\int d^3r'\;\frac{n(\vec{r})\,n(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}$$

gegeben. Die Methode läßt sich nur auf neutrale Atome und positive Ionen anwenden, wir können daher $N = \lambda Z$ mit $0 < \lambda \leq 1$ setzen.

a) Lieb und Simon konnten zeigen, daß für die tatsächliche Grundzustandsenergie $E^0_{Z,N}$ die asymptotische Beziehung

$$\lim_{Z\to\infty} E_{Z,\lambda Z}/E^0_{Z,\lambda Z} = 1$$

gilt. Daraus läßt sich die Z-Abhängigkeit der Energie großer Atome bestimmen: Zeigen Sie für radialsymmetrische Elektronendichten, daß

$$n_{Z,\lambda Z}(r) = Z^2\, n_{1,\lambda}(Z^{1/3}r)\ .$$

Ist dies kompatibel mit der Teilchenzahlerhaltung? Bestimmen Sie daraus die Z-Abhängigkeit von $E_{Z,\lambda Z}$ und damit, für große Z, von $E^0_{Z,\lambda Z}$. (3)

b) Eine Verbesserung der Thomas–Fermi-Näherung wurde von Dirac vorgeschlagen, der durch Addition des Terms

$$-\frac{3}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e^2\int d^3r\; n^{4/3}(\vec{r})$$

zu $E_{Z,N}[n]$ eine effektive Austauschwechselwirkung der Elektronen einbezog. Zeigen Sie analog zur Vorlesung, daß mit dieser Korrektur die durch

$$\phi(r) + \frac{e}{2\pi^2 a_0} = \frac{Ze}{r}\,\chi(r)$$

definierte Funktion χ die nun nicht mehr universelle Gleichung

$$\chi''(s) = s\big[s^{-1/2}\chi^{1/2}(s) + \beta(Z)\big]^3$$

erfüllt. Wie lautet sie im Limes $Z\to\infty$? (3)

c) Gewinnen Sie aus der Annahme, die N Elektronen mögen sich innerhalb einer Kugel mit Radius r_0 aufhalten, und der Randbedingung $\chi(0) = 1$ die Beziehung

$$\chi(s_0) - s_0\chi'(s_0) = \frac{Z-N}{Z}\ .$$

(Aus dieser erhält man die obige Einschränkung $N \leq Z$.) (2)