

## Übungen zur Computational Physics

### Aufgabe 7 — Slater-Determinante

Gegeben seien die (normierten) Ein-Teilchen-Orbitale  $\psi_\alpha(x)$ , wobei  $x = (\mathbf{r}, \sigma)$  und  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ , d.h.

$$\int dx |\psi_\alpha(x)|^2 = \sum_\sigma \int d^3r |\psi_\alpha(\mathbf{r})|\sigma\rangle|^2 = 1.$$

Zeigen Sie für ein System von  $N$  Fermionen mit Spin  $1/2$ , dass die Slater-Determinante

$$\Psi_{AS}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon_{\mathcal{P}} \mathcal{P} \psi_{\alpha_1}(x_1) \cdots \psi_{\alpha_N}(x_N)$$

auf Eins normiert ist!

Zeigen Sie weiter, dass für die Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Fermion bei  $x$  zu finden, gilt:

$$\rho(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\psi_{\alpha_i}(x)|^2$$

### Aufgabe 8 — Sommerfeld-Modell

Im Sommerfeld-Modell eines Metalls ist  $H = \sum_{i=1}^N H_i$ , das heißt die elektronische Struktur wird approximativ durch nichtwechselwirkende Elektronen beschrieben. Desweiteren sei  $H_i = \mathbf{p}_i^2/2m$ , das heißt die Elektronen werden desweiteren als frei angenommen (kein äußeres Potenzial).

Zeigen Sie, dass die Fermi-Fläche in diesem Fall eine Kugeloberfläche ist!

Berechnen Sie die Länge eines Fermi-Wellenvektors für ein System mit einer gegebenen Elektronendichte  $n = N/V$ , wobei  $N$  die Elektronenzahl und  $V$  das Systemvolumen ist!

Berechnen Sie die Fermi-Energie!

Berechnen Sie die Grundzustandsenergie!

Berechnen Sie die mittlere Energie pro Elektron!