Übungen zur Computational Physics

Aufgabe 8 — Slater-Determinante
Gegeben seien die (normierten) Ein-Teilchen-Orbitale $\psi_\alpha(x)$, wobei $x = (\boldsymbol{r}, \sigma)$ und $\sigma =\uparrow, \downarrow$, d.h.

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

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

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

auf Eins normiert ist!

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

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

und berechnen Sie durch

$$\rho(x_1, x_2) = \int dx_3 \cdots dx_N |\Psi_{\mathrm{AS}}(x_1, ..., x_N)|^2$$

definierte die Paarkorrelationsfunktion!

Aufgabe 9 — 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 $H_i = \boldsymbol{p}_i^2/2m$, dass 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!