Aufgabe 18: Wärmekapazität eines Festkörpers (schriftlich, 8 Punkte)

Betrachten Sie einen Festkörper aus N Atomen, die um ihre Gleichgewichts-Positionen herum harmonische Schwingungen ausführen können.

a) [3P] Zeigen Sie mittels des Gleichverteilungssatzes, dass in klassischer Betrachtungsweise die Wärmekapazität des Systems durch $C = 3\,N\,k_B$ gegeben ist. Zeigen Sie ferner, dass Ihr Ergebnis nicht davon abhängt, ob die Schwingungen aneinander gekoppelt sind oder nicht.

b) [5P] Betrachten Sie das System nun quantenmechanisch (am besten im kanonischen Ensemble). Hierzu nehmen Sie an, dass die Transformation der Schwingungen zu den $3\,N$ ungekoppelten Eigenmoden bereits stattgefunden habe, und dass die $3\,N$ Eigenfrequenzen einer Zustandsdichte $D\,(\omega) = 9\,N\,\omega^2/\omega_D^3$ für $\omega < \omega_D$, $D\,(\omega) = 0$ für $\omega > \omega_D$ genügen möge (Zustandsdichte = „Zahl der Zustände (hier: Frequenzen) pro Frequenzintervall“). [Diese Zustandsdichte erfüllt die Forderung $\int_0^\infty D\,(\omega)\,d\,\omega = 3\,N$.] Die $3\,N$ Oszillatoren sollen als „unterscheidbar“ behandelt werden. Bestimmen Sie erneut die Wärmekapazität (unter Verwendung von Ergebnissen vorheriger Aufgaben) und diskutieren Sie ihr Verhalten im Grenzfall kleiner und großer Temperaturen. Zeigen Sie, dass sich die Wärmekapazität bei tiefen Temperaturen wie $\sim T^3$ verhält. <u>Hinweis:</u> $\displaystyle\int_0^\infty \frac{x^4\,e^x}{(e^x\,-\,1)^2}\,d\,x = \frac{4}{15}\,\pi^4$.

Aufgabe 19: 2. Quantisierung (mündlich, 12 Punkte)

Gegeben sei ein fermionisches N-Teilchen-System, dessen Hamilton-Operator nach 2. Quantisierung (mit orthonormaler Einteilchen-Basis $\{|m\rangle\}$) durch $\hat{H} = \sum\limits_{kl} h_{k,l}\,\hat{a}_k^\dagger\,\hat{a}_l + \frac{1}{2}\sum\limits_{klmn} v_{kl,mn}\,\hat{a}_k^\dagger\,\hat{a}_l^\dagger\,\hat{a}_n\,\hat{a}_m$ gegeben sei.

a) [4P] Nehmen Sie an, der N-Teilchen-Grundzustand sei durch eine einzelne Slater-Determinante gegeben, wobei die ersten N Zustände besetzt seien. Bestimmen Sie die Gesamtenergie $E_N^{(0)}$ dieses Zustandes. Zeigen Sie, dass die Minimierung der Energie bezüglich der Einteilchen-Basiszustände (d. h. Funktional-Ableiten nach $\phi_m^*\,(x)$) auf die Hartree-Fock-Gleichungen führt (mit Hartree-Fock-Energien $\epsilon_m = h_{m,m} + \sum_{l=1}^N (v_{lm,\,lm} - v_{lm,\,ml})$).

b) [4P] Nehmen Sie im Folgenden an, dass die Einteilchen-Basiszustände $\{|m\rangle\}$ die Hartree-Fock-Gleichungen erfüllen. Bestimmen Sie die Gesamtenergie $E_{(N+1)}^{(m)}$ eines $(N+1)$-Teilchen-Zustandes, bei dem zur Slater-Determinante aus a) ein weiteres Teilchen im vormals unbesetzten Zustand m hinzugefügt wurde. Zeigen Sie, dass $E_{(N+1)}^{(m)} = E_N^{(0)} + \epsilon_m$ gilt (Koopmans'sches Theorem).

c) [2P] Wiederholen Sie b) für einen $(N-1)$-Teilchen-Zustand, bei dem aus der Slater-Determinante aus a) ein Teilchen aus dem vormals besetzten Zustand m entfernt wurde. Zeigen Sie, dass $E_{(N-1)}^{(m)} = E_N^{(0)} - \epsilon_m$ gilt (auch Koopmans'sches Theorem).

d) [2P] Wiederholen Sie b), c) für einen N-Teilchen-Zustand, bei dem aus der Slater-Determinante aus a) ein Teilchen aus dem vormals besetzten Zustand m in einen vormals unbesetzten Zustand n angeregt wurde. Gilt hier $E_N^{(mn)} = E_N^{(0)} + \epsilon_n - \epsilon_m$?