

**Übung 1.** [Paarkorrelationsfunktion und Austauschloch]

Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit  $g(\vec{r})$  im Abstand  $\vec{r}$  eines Fermions, das sich im Ursprung befindet, ein anderes Fermion mit beliebigem Spin zu finden.

Wie gross ist die gesamte Dichte-Reduktion

$$R = \nu \int d^3r (g(\vec{r}) - 1) \tag{1}$$

durch die Anwesenheit des Fermions?  $\nu$  sei dabei die Teilchendichte.

**Lösung.** In der Vorlesung wurde die Paarkorrelationsfunktion  $g_{ss'}(\vec{x} - \vec{x}')$  definiert und explizit ausgerechnet für die Fälle  $s \neq s'$  und  $s = s'$ . Die gesamte Wahrscheinlichkeit  $g(\vec{r})$  ein anderes Fermion im Abstand  $\vec{r}$  eines gegebenen Fermions zu finden, ist dann durch

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{2} [g_{\uparrow\uparrow}(\vec{r}) + g_{\uparrow\downarrow}(\vec{r})] \tag{L.1}$$

gegeben. Bevor wir die totale Dichte-Reduktion ausrechnen, ist es gut, die Ausdrücke für die Paarkorrelationsfunktion in den zwei Fällen  $s \neq s'$  und  $s = s'$  zu rekapitulieren

$$g_{ss'}(\vec{x} - \vec{x}') = \begin{cases} 1 & s \neq s' \\ 1 - \left(\frac{2}{\nu}\right)^2 G_s(\vec{x} - \vec{x}')^2 & s = s' \end{cases}, \tag{L.2}$$

wobei  $G_s(\vec{x} - \vec{x}')$  die Einteilchen Korrelationsfunktion ist. Damit folgt für die Dichte-Reduktion:

$$\begin{aligned} R = \nu \int d^3r (g(\vec{r}) - 1) &= -\frac{2}{\nu} \int d^3r G_s(\vec{x} - \vec{x}')^2 \\ &= -\frac{2}{\nu} \int d^3r \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}; \vec{k}'} n_{\vec{k},s} n_{\vec{k}',s} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \\ &= -\frac{2}{nV} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k},s} = -1. \end{aligned}$$

Dieses Resultat lässt sich folgendermassen interpretieren: Das Austauschloch beinhaltet gerade ein einzelnes Fermion. Mit anderen Worten, jedes Fermion im Raum nimmt ein gewisses Volumen (je nach Dichte  $\nu$ ) für sich in Anspruch.

**Übung 2.** [Porphyrin Ring]

Ein Porphyrin Ring ist ein Molekül, das Bestandteil von Hämoglobin, Chlorophyll und anderer wichtiger Verbindungen ist. Einige Aspekte der Physik dieses Moleküls können beschrieben werden, indem es als eindimensionaler, kreisförmiger Pfad mit Radius  $r = 0.4$  nm beschrieben wird, auf dem sich 18 Elektronen bewegen.

- Ermitteln Sie die normierten Einteilchen-Energieeigenfunktionen des Systems unter der Annahme, dass die Elektronen nicht wechselwirken.
- Wie viele Elektronen befinden sich auf jedem Rotationsniveau im Grundzustand des Moleküls?
- Was ist die niedrigste elektronische Anregung des Moleküls? Was ist die dazugehörige Wellenlänge (geben Sie einen numerischen Wert in nm an), bei der das Molekül Strahlung absorbieren kann?

**Lösung.** a)

We denote the angular co-ordinate of an electron by  $\theta$ . The Schrödinger equation of an electron

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \psi(\theta) = E\psi(\theta),$$

has solution  $\psi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} e^{ik\theta}$ . We make use of the normalisation condition  $\int_0^{2\pi} |\psi(\theta)|^2 r d\theta = 1$ . As the wavefunction must be single valued (first Born condition) on the domain  $[0, 2\pi]$  we have  $\psi(\theta + 2\pi k) = \psi(\theta)$  where  $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . The energy levels are given by

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr^2} k^2. \quad (\text{L.3})$$

b)

Let  $0, 1, 2$  denote the energy levels  $E_0, E_1, E_2, \dots$  respectively. In accordance with Pauli's exclusion principle,  $E_0$  can accommodate two electrons of opposite spins, while  $E_k, k \neq 0$ , which is two-fold degenerate with respect to  $\pm|k|$ , may accommodate four electrons, because of the spin and angular degeneracy. This, the electron configuration of the ground state of the system is  $0^2 1^4 2^4 3^4 4^4$ .

c)

Using Eq (L.3) the electron configuration of the first excited state is  $0^2 1^4 2^4 3^4 4^3 5^1$ . The energy difference between  $E_4$  and  $E_5$  is

$$\Delta E = E_5 - E_4 = \frac{\hbar^2}{2mr^2} (5^2 - 4^2) = \frac{9\hbar^2}{2mr^2},$$

and the corresponding absorption wavelength is

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{8\pi^2}{9} \left( \frac{mc}{h} \right) r^2 = \frac{8\pi^2}{9} \times \frac{4^2}{0.0242} = 5800 \text{ nm},$$

where  $\frac{h}{mc} = 0.0242 \text{ nm}$  is the Compton wavelength of the electron.

**Übung 3.** [Wechselwirkende Fermionen im Oszillatorpotential]

$N$  Fermionen ohne Spin und mit Masse  $m$  werden in einem eindimensionalen harmonischen Potential platziert, mit einem abstossenden  $\delta$ -Potential zwischen jedem Paar.

$$V = \frac{k}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{i \neq j} \delta(x_i - x_j), \quad k, \lambda > 0. \quad (2)$$

Berechnen Sie die Wellenfunktionen und Energien der drei niedrigsten Energieniveaus des Systems bzgl. der normierten Ein-Teilchen harmonischen Oszillatorfunktionen  $\psi_n(x)$ . Wie sind diese Niveaus entartet?

**Lösung.** Treat the  $\delta$ -function potential as a perturbation. As for a system of fermions, the total wave function is antisymmetric, so the unperturbed wave function can of course be expressed as a Slater determinant (to ensure the antisymmetry condition is correctly imposed)

$$\begin{aligned}\psi_{n_1 \dots n_N}(x_1 \dots x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) & \dots & \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \delta_{\mathcal{P}} \mathcal{P}[\psi_{n_1}(x_1) \dots \psi_{n_N}(x_N)],\end{aligned}$$

where the  $n_i$  label the states from the ground state upwards,  $\mathcal{P}$  denotes permutations among the  $x_i$  and  $\delta_{\mathcal{P}} = \pm 1$  to account for the even and odd permutations, respectively,

$$\delta_{\mathcal{P}} = \begin{cases} 1 & \text{for an even number of permutations,} \\ -1, & \text{for an odd number of permutations.} \end{cases}$$

On account of the Dirac  $\delta$ -function, the matrix elements of the perturbation Hamiltonian are all zero, as  $x_i \neq x_j$  because of the antisymmetric nature of the wavefunction (the Pauli exclusion principle) so now two fermion can have the same  $x_i$ . Note that this is *only* true because they are spinless, if there was a spin part of the wavefunction then it would be possible for two fermions to have the same  $x_i$  and the Dirac delta function would then no longer vanish. Thus, using the Hamiltonian for a quantum harmonic oscillator with  $N$  particles, the energy levels are just

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \langle n_1 \dots n_N | H | n_1 \dots n_N \rangle = \hbar\omega \left( \frac{N}{2} + \sum_{i=1}^N n_i \right), \quad (\text{L.4})$$

where  $\omega = \frac{k}{m}$ .

- a) For the ground state:  $n_1 \dots n_N$  are respectively  $0, 1, \dots, N-1$ , and, using (L.3) the energy is

$$E_{(0, \dots, N-1)} = \hbar\omega \left( \frac{N}{2} + \frac{N(N-1)}{2} \right) = \frac{\hbar\omega N^2}{2},$$

and the corresponding wave function is

$$\psi_{0,1, \dots, N-1}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \delta_{\mathcal{P}} \mathcal{P}[\psi_0(x_1) \dots \psi_{N-1}(x_N)].$$

- b) For the first excited state:  $n_1 \dots n_N$  are respectively  $0, 1, \dots, N-2, N$ , the energy is

$$\begin{aligned}E_{(0, \dots, N-2, N)} &= E_{0, \dots, N-2} + E_N \\ &= \hbar\omega \left( \frac{N-1}{2} + \frac{(N-1)(N-2)}{2} \right) + \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + N \right) = \hbar\omega \cdot \frac{N^2 + 2}{2}.\end{aligned}$$

The corresponding wave function is

$$\psi_{0,1, \dots, N-2, N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \delta_{\mathcal{P}} \mathcal{P}[\psi_0(x_1) \dots \psi_{N-2}(x_{N-1}) \psi_N(x_N)].$$

- c) For the second excited state:  $n_1 \cdots n_N$  are respectively either  $0, 1, \cdots, N-2, N+1$  or  $0, 1, \cdots, N-3, N-1, N$ . The energy is

$$E_{(0, \dots, N-2, N+1)} = E_{(0, 1, \dots, N-3, N-1, N)} = \frac{\hbar\omega}{2} (N^2 + 4),$$

and the corresponding wave functions are

$$\begin{aligned} & \psi_{0, \dots, N-2, N+1}(x_1, \dots, x_N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \delta_{\mathcal{P}} \mathcal{P}[\psi_0(x_1) \cdots \psi_{N-2}(x_{N-1}) \psi_{N+1}(x_N)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \psi_{0, \dots, N-3, N-1, N}(x_1, \dots, x_N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \delta_{\mathcal{P}} \mathcal{P}[\psi_0(x_1) \cdots \psi_{N-3}(x_{N-2}) \psi_{N-1}(x_{N-1}) \psi_N(x_N)]. \end{aligned}$$

It is apparent that the ground and first excited states are non-degenerate whilst the second excited state is doubly degenerate.