
Aufgabe 6.1 Thomas-Fermi-Atom

Diese Aufgabe hat zum Ziel, einige Details der Seiten 78ff. im Skript genauer zu studieren.

a) Aus der Variation des Thomas-Fermi-Funktionals folgt

$$(3\pi^2 n_*(\mathbf{x}))^{\frac{2}{3}} = (V(\mathbf{x}) + \lambda)_+. \tag{1}$$

Dies ist die notwendige und hinreichende Bedingung für die minimierende Dichte $n_*(\mathbf{x})$. Wir zeigen, dass eine sphärisch symmetrische Lösung existiert, was wegen der Eindeutigkeit (das Thomas-Fermi-Funktional ist *strikt* konvex) genügt. Verwende also die Poissongleichung

$$\Delta V(\mathbf{x}) = 4\pi n_*(\mathbf{x}) \qquad (\mathbf{x} \neq 0)$$

mit dem rotationssymmetrischen Ansatz

$$(V(\mathbf{x}) + \lambda)_+ = \frac{Z}{r}\chi(r) \qquad (r = |\mathbf{x}|),$$

um die Thomas-Fermi-Gleichung

$$\chi''(r) = \frac{4}{3\pi} Z^{\frac{1}{2}} r^{-\frac{1}{2}} \chi(r)^{\frac{3}{2}}$$

herzuleiten. Verwende nun die reskalierte Variable $\xi := (\frac{4}{3\pi})^{\frac{2}{3}} Z^{\frac{1}{3}} r$, um die Z-unabhängige Gleichung

$$\chi''(\xi) = \xi^{-\frac{1}{2}} \chi(\xi)^{\frac{3}{2}}$$

zu erhalten. Was bedeutet dies für den Atomradius in Abhängigkeit von Z in der Thomas-Fermi-Theorie (Begründung!)?

b) Lies den Abschnitt über positive Ionen auf S.82/83.

c) Wir betrachten ein neutrales Atom. Dann folgt aus (1), dass $\lambda = 0$. Wieso? Ferner folgt aus (8.107) und (8.111) im Skript, dass

$$\delta\mathcal{E}(n_*) = \int d^3x \delta n(\mathbf{x})((3\pi^2 n_*(\mathbf{x}))^{\frac{2}{3}} - V(\mathbf{x})) = 0$$

für *beliebige* Variationen δn von n_*. Zeige damit Gleichung (8.119) im Skript, also

$$T(n_*) : C(n_*) : R(n_*) = 3 : 7 : 1,$$

wobei T den kinetischen Anteil, C den Elektron-Kern-Wechselwirkungsanteil und R den Elektron-Elektron-Wechselwirkungsanteil der Thomas-Fermi-Energie bezeichnen.

Aufgabe 6.2 Variationelle Bestimmung von Eigenwerten

Sei H ein selbstadjungierter Operator auf einem N-dimensionalen Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit Eigenwerten $E_1 \leq E_2 \leq \cdots \leq E_N$.

a) (Variationsprinzip von Fischer-Courant-Weyl, Min(i)Max-Prinzip)

$$E_n = \min_{\substack{V \subset \mathcal{H} \\ \dim V = n}} \max_{\substack{\varphi \in V \\ \varphi \neq 0}} \frac{\langle \varphi, H\varphi \rangle}{\langle \varphi, \varphi \rangle}.$$

Bemerkung: Das Variationsprinzip von Rayleigh-Ritz ist ein Spezialfall davon.

b) Sei H_1 ein weiterer Operator auf $\mathcal{H}$ mit $H \leq H_1$ (i.e. $\langle \varphi, H\varphi \rangle \leq \langle \varphi, H_1\varphi \rangle \; \forall \varphi \in \mathcal{H}$). Zeige

$$E_i(H) \leq E_i(H_1) \qquad \forall i.$$

c) Für die Behandlung des Thomas-Fermi-Atoms haben wir den (negativen) Laplace-Operator $-\Delta_\Omega$ auf einem Würfel Ω der Kantenlänge L mit Dirichlet-Randbedingungen diagonalisiert (S. 64/65). Wir stellen uns vor, dass wir von diesem Würfel einen Teil (z.B. um eine Ecke herum) entfernen. Den so erhaltenen Konfigurationsraum bezeichnen wir mit Ω' (i.e. $\Omega' \subset \Omega$) und nehmen dort wieder Dirichlet-Randbedingungen an.

Welches qualitative Verhalten der Eigenwerte von $-\Delta_{\Omega'}$ ist zu erwarten (im Vergleich zu denjenigen von $-\Delta_\Omega$)?

Aufgabe 6.3 Schrödingergleichung in einem beschleunigten Bezugssystem

Betrachtet man einen rotierenden Eisenstab, so ist es zweckmässig, in ein rotierendes Bezugssystem überzugehen, da in einem solchen das Potential, welches von den Atomrümpfen erzeugt wird, *zeitunabhängig* wird. Ferner kann man so auch Effekte eines äusseren Magnetfeldes wegtransformieren.
Um die Übersicht zu behalten, betrachten wir bloss ein einzelnes Elektron, welches in einem Inertialsystem (Laborsystem) mit Koordinaten $\mathbf{x}$ einem skalaren Potential $\Phi(\mathbf{x}, t)$ (Atomrümpfe im Hintergrund) und einem Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ (externes Magnetfeld $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$) in der Coulombeichung unterworfen sei. Der realistischere Fall von N Elektronen wird genau gleich behandelt.
Mit $\mathbf{y}$ bezeichnen wir die Koordinaten des Elektrons bezüglich des körperfesten (rotierenden) Bezugsystems, also $\mathbf{y} = R(t)^{-1}\mathbf{x}$, $R(t) \in SO(3)$; oder allgemeiner $\mathbf{y} = \phi_t(\mathbf{x})$, wobei $\phi_t(\cdot)$ durch ein divergenzfreies Vektorfeld erzeugt werde (dann ist die Jacobische der Koordinatentransformation gleich 1 und die Wahrscheinlichkeitserhaltung kann einfacher berücksichtigt werden):

$$\partial_t \phi_t(\mathbf{x}) = \mathbf{V}(\phi_t(x)), \qquad \nabla \cdot \mathbf{V} = 0.$$

Unabhängig davon können wir die Spinkoordinaten mit $U(t) \in SU(2)$ transformieren, sodass im bewegten Koordinatensystem die Wellenfunktion gegeben ist durch

$$\tilde{\psi}(\mathbf{y}, t) = U(t)\psi(R(t)\mathbf{y}, t).$$

Hier bezeichnet $\psi(\mathbf{x}, t)$ die $\mathbb{C}^2$-wertige Wellenfunktion im Laborsystem.

a) Zeige, dass im körperfesten Bezugssystem die Schrödingergleichung wie folgt aussieht ($\hbar = 1$, $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{y}, t) := R(t)^{-1}\mathbf{A}(R(t)\mathbf{y}, t)$, analog $\tilde{\mathbf{V}}$, $\tilde{\mathbf{B}}$, ferner $\tilde{\Phi}(\mathbf{y}) := \Phi(R(t)\mathbf{y}, t)$):

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\partial_t \tilde{\psi}(\mathbf{y}, t) = {} & [\frac{1}{2m}(\mathrm{i}\nabla_{\mathbf{y}} - \frac{e}{c}\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{y}, t) - m\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y}))^2 - \frac{e}{c}\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{y}, t) \cdot \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y}) - \frac{m}{2}\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y})^2]\tilde{\psi}(\mathbf{y}, t) \\ & + \tilde{\Phi}(\mathbf{y})\tilde{\psi}(\mathbf{y}, t) + \mathrm{i}\dot{U}(t)U(t)^*\tilde{\psi}(\mathbf{y}, t) + g\mu_B U(t)(R(t)^{-1}\hat{\mathbf{S}}) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{y}, t)U(t)^*\tilde{\psi}(\mathbf{y}, t). \end{aligned}$$

Identifiziere die Potentiale der Corioliskraft und der Zentrifugalkraft. Wie sieht es im allgemeineren Fall aus (also $\phi_t(\cdot)$ nicht zwingend eine Rotation)?

b) Zeige das *Larmor-Theorem* für die Quantenmechanik: Es gibt ein Bezugssystem, in welchem man den Effekt eines Magnetfeldes auf Bahn und Spin (in erster Ordnung) wegtransformieren kann.

c) Sei $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0$. Was geschieht mit einem Eisenstab, den man ganz schnell um seine Achse rotieren lässt (*Barnett-Effekt*)?