Übungen zur Theoretischen Physik II: Mechanik

Prof. J. Bosse, FU Berlin

WiSe 2005/06

Blatt 12, Abgabetermin: 30.01.06

1. *Dichte–Korrelation* 20 P

   (a) Verifizieren Sie

   $$\langle\, N(\mathbf{r})N(\mathbf{r}')\,\rangle \;=\; n\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + n\,\langle\, \Pi(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\rangle\ , \tag{1}$$

   $$\Pi(\mathbf{r}) \;:=\; \frac{1}{N}\sum_{ij}{}'\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_{ij}) \tag{2}$$

   für die Korrelation der Teilchendichten bei $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ in einem *homogenen* Vielteilchensystem. Darin ist $n := N/V$, $\mathbf{r}_{ij} := \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ und $N(\mathbf{r}) := \sum_{j=1}^{N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)$. Die Darstellung Gl.(1) zeigt explizit, dass die Korrelationsfunktion nur vom Differenzvektor $(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ abhängt.

   Hinweis: Benutzen Sie die Translationsinvarianz der potentiellen Energie,

   $$U(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) = U(\mathbf{r}_1+\mathbf{a},\ldots,\mathbf{r}_N+\mathbf{a})\ , \tag{3}$$

   bei einer beliebigen Verschiebung $\mathbf{a}$ zur Vereinfachung der Volumenintegrationen im thermischen Mittelwert.

   (b) *Paarkorrelationsfunktion*: Die auf der rechten Seite von Gl.(1) noch zu mittelnde Variable $\Pi(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ beschreibt die "Dichte von Teilchenpaaren". Man definiert deshalb die (dimensionslose) *Paarkorrelationsfunktion* $g(\mathbf{r})$ des Vielteilchensystems durch

   $$ng(\mathbf{r}) := \langle\, \Pi(\mathbf{r})\,\rangle\ . \tag{4}$$

   Leiten Sie aus Gln.(1),(4)

   $$\langle\, \delta N(\mathbf{r})\delta N(\mathbf{r}')\,\rangle = n\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + n^2\,[g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-1] \tag{5}$$

   für die Korrelationsfunktion der *Dichtefluktuationen* her ($\delta A := A - \langle\, A\,\rangle$).

(c) *Strukturfaktor:* Für die Anwendungen von besonderem Interesse ist der sog. *(statische) Strukturfaktor*[1]

$$S(\mathbf{q}) := \frac{1}{N} \left\langle \, | \, \delta N_{\mathbf{q}} |^2 \, \right\rangle \ , \tag{6}$$

eine Korrelationsfunktion FOURIER–transformierter Dichtefluktuationen,

$$\delta N_{\mathbf{q}} := \int \mathrm{d}^3 r \ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \delta N(\mathbf{r}) \ . \tag{7}$$

Leiten Sie den Zusammenhang

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n \int \mathrm{d}^3 r \ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[g(\mathbf{r}) - 1 \right] \tag{8}$$

zwischen Strukturfaktor und Paarkorrelationsfunktion her. Geben Sie auch die Umkehrformel an, bei der obige Gleichung nach $g(\mathbf{r})$ "aufgelöst" ist.

Hinweis: Beachten Sie, dass man

$$\langle \, \delta N(\mathbf{r}) \delta N(\mathbf{r}') \, \rangle = \frac{1}{V} \int \mathrm{d}^3 r'' \ \ \langle \, \delta N(\mathbf{r} + \mathbf{r}'') \delta N(\mathbf{r}' + \mathbf{r}'') \, \rangle \tag{9}$$

schreiben darf, weil die Korrelationsfunktion auf der linken Seite in einem homogenen System nur vom Differenzvektor $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ abhängt (siehe Gl.(1)) und weil $\int \mathrm{d}^3 r = V$ ist.

2. *Paarkorrelationsfunktion eines Elektronengases* 20 P

   Der Strukturfaktor von Elektronen in einem Metall kann näherungsweise durch

$$S(q) = \begin{cases} \frac{3}{2}\hat{q}\left(1 - \frac{1}{3}\hat{q}^2\right) & \text{für} \quad \hat{q} \le 1 \\ 1 & \text{für} \quad \hat{q} > 1 \end{cases} \tag{10}$$

   beschrieben werden.[2] Darin bezeichnet $\hat{q} := |\mathbf{q}| l$ eine dimensionslose Wellenzahl, und l eine durch die Elektronendichte n (und den Spin s) charakterisierte Längeneinheit, $nl^3 = (2s+1)/(48\pi^2)$.

   (a) Skizzieren Sie $S(q)$ als Funktion von $\hat{q}$.

[1] Der Strukturfaktor ist direkt messbar in Streuexperimenten. Er bestimmt den differentiellen Wirkungsquerschnitt bei Streuung von z.B. Licht oder Neutronen an dem betrachteten System.

[2] "Jellium–Modell" nicht–wechselwirkender Fermionen mit Spin s bei T=0K.

(b) Berechnen Sie die Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ des Elektronengases.

(c) Wie lautet $g(r{=}0)$? Diskutieren Sie $g(r)$ für sehr kleine Abstände, $r \ll l$. Welche physikalische Ursache haben die beobachteten Abweichungen vom Verhalten eines *klassischen* idealen Gases?

(d) Skizzieren Sie $g(r)$ als Funktion von $\hat{r}{=}|\mathbf{r}|/l$ für Spin $s{=}1/2$.