

Institut für physikalische Chemie der Universität Frankfurt am Main

Das eingeschränkte Fermigas

2. Teil: Das Austauschintegral

Von

H. HARTMANN, W. ILSE und G. GLIEMANN

Es wird das Austauschintegral zwischen den Eigenfunktionen des eingeschränkten Fermigas angegeben.

The exchange integral between the eigenfunctions of the limited Fermi gas model is given.

On donne l'intégrale de résonance entre les fonctions d'onde d'un gaz de Fermi limité.

Wenn man bei der Behandlung des eingeschränkten Fermigas [1] in nächster Näherung die Wechselwirkung zwischen den Teilchen berücksichtigen will, tritt das Austauschintegral zwischen Eigenfunktionen auf, die ebene Wellen darstellen, welche den Randbedingungen des eingeschränkten Gases genügen. Bei der Beschränkung auf den Fall $0 < D/a \ll 1$ brauchen nur solche Funktionen in Betracht gezogen zu werden, die in z -Richtung (senkrecht zu den Begrenzungsflächen) keine Knotenstellen aufweisen. Sie lauten

$$\psi_r = \sqrt{\frac{2}{DF}} \cos \frac{\pi z}{D} e^{i(k_x^{(r)} x + k_y^{(r)} y)} \quad (1)$$

bzw.

$$\psi_s = \sqrt{\frac{2}{DF}} \cos \frac{\pi z}{D} e^{i(k_x^{(s)} x + k_y^{(s)} y)} \quad (2)$$

F ist die Größe der Fläche in der x, y -Ebene, in bezug auf die die ψ normiert sind. Eine solche Normierung ist sinnvoll, wenn wir eine Gasmenge betrachten, deren Behälter in z -Richtung die Dicke D hat und der sich in x - und y -Richtung sehr weit, aber endlich weit ausdehnt. Die Eigenfunktionen der Form (1) bzw. (2) genügen dann zwar an den äußeren Behälterwänden nicht den richtigen Randbedingungen. Der Fehler, der dadurch entsteht, daß wir die in dieser Beziehung „falschen“ Eigenfunktionen (1) bzw. (2) verwenden, dürfte aber für den Fall $\sqrt{F} \gg D$ kaum ins Gewicht fallen.

Jede der betrachteten ψ -Funktionen wird durch die zu den Hauptbegrenzungsflächen parallelen Komponenten eines Wellenvektors $k_x^{(r)}, k_y^{(r)}$ bzw. $k_x^{(s)}, k_y^{(s)}$ charakterisiert. Diese Komponenten hängen mit den entsprechenden Impulskomponenten nach

$$p_x^{(r)} = -\hbar k_x^{(r)}, \quad p_y^{(r)} = -\hbar k_y^{(r)} \quad (3)$$

bzw.

$$p_x^{(s)} = -\hbar k_x^{(s)}, \quad p_y^{(s)} = -\hbar k_y^{(s)} \quad (4)$$

zusammen.

Das Austauschintegral zwischen ψ_r und ψ_s ist durch

$$A_{rs} = e^2 \iint \psi_r(1) \psi_s^*(1) \frac{1}{|r_2 - r_1|} \psi_r^*(2) \psi_s(2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (5)$$

definiert. Die Zeichen sind folgendermaßen erklärt:

$$\begin{aligned} d\tau_1 &= dx_1 dy_1 dz_1, \quad d\tau_2 = dx_2 dy_2 dz_2, \\ „1“: x_1, y_1, z_1(r_1), \quad „2“: x_2, y_2, z_2(r_2), \\ |r_2 - r_1| &= +\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}. \end{aligned}$$

Beide Integrationen sind über den ganzen Behälter zu erstrecken.

Mit

$$V(1) = \int \frac{1}{|r_2 - r_1|} \psi_r^*(2) \psi_s(2) d\tau_2 \quad (6)$$

kann man für das Austauschintegral auch

$$A_{rs} = e^2 \int \psi_r(1) \psi_s^*(1) V(1) d\tau_1 \quad (7)$$

schreiben. Wenn man in (6) die Integrationen nach x und y nun abweichend jeweils mit den Grenzen $-\infty$ und $+\infty$ ausführt, macht man einen Fehler am äußeren Rand des Behälters. Für den Fall $\sqrt{F} \gg D$ wird er praktisch bedeutungslos. Unter diesen Umständen ist also in sehr guter Näherung

$$\begin{aligned} V(x_1, y_1, z_1) &= \int_{-D/2}^{D/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}} \frac{2}{DF} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_2 \cdot \\ &\quad \cdot e^{i[(k_x^{(s)} - k_x^{(r)})x_2 + (k_y^{(s)} - k_y^{(r)})y_2]} dx_2 dy_2 dz_2. \end{aligned} \quad (8)$$

Mit der Koordinatentransformation

$$\begin{aligned} x_2 - x_1 &= x & x_2 &= x + x_1 & dx_2 &= dx \\ y_2 - y_1 &= y & y_2 &= y + y_1 & dy_2 &= dy \end{aligned} \quad (9)$$

und der vereinfachten Bezeichnung

$$k_x^{(s)} - k_x^{(r)} = k_x, \quad k_y^{(s)} - k_y^{(r)} = k_y, \quad a^2 = y^2 + (z_2 - z_1)^2 \quad (10)$$

entsteht aus (8):

$$V(x_1, y_1, z_1) = \frac{2}{DF} e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)} \int_{-D/2}^{D/2} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_2 dz_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_y y} dy \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{x^2 + a^2}} dx. \quad (11)$$

Aus einer bekannten Integraldarstellung der Hankelschen Funktionen [2] folgt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{x^2 + a^2}} dx = \pi i H_0^{(1)}(i a |k_x|). \quad (12)$$

Damit wird:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_y y} dy \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{x^2 + a^2}} dx \\ &= \pi i \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_y y} H_0^{(1)}(|k_x| \sqrt{-(z_2 - z_1)^2 - y^2}) dy. \end{aligned} \quad (13)$$

Mit Hilfe einer Beziehung aus der Theorie der Fouriertransformationen folgt daraus

$$I_1 = \frac{2\pi}{W} e^{\mp W(z_2 - z_1)}, \quad (14)$$

wobei W durch

$$W = +\sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (15)$$

definiert ist.

Jetzt ergibt sich also schließlich für V :

$$V = \frac{4\pi}{DFW} e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)} \cdot I_2, \quad (16)$$

mit

$$I_2 = \int_{-D/2}^{D/2} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_2 e^{\mp W(z_2 - z_1)} dz_2. \quad (17)$$

Das Vorzeichen des Exponenten muß so festgelegt werden, daß nach POISSON ($\Delta V = -4\pi\rho$) aus V wieder die potentialerzeugende Dichtefunktion ψ_r^* ψ_s hergeleitet werden kann. Diese Bedingung wird erfüllt durch

$$I_2 = \int_{z_1}^{D/2} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_2 e^{-W(z_2 - z_1)} dz_2 + \int_{-D/2}^{z_1} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_2 e^{W(z_2 - z_1)} dz_2. \quad (18)$$

Elementare Integration ergibt nun:

$$I_2 = \frac{1}{W(1 + \frac{\alpha^2}{4})} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} \cos^2 t_1 - e^{-\frac{\alpha\pi}{2}} \mathfrak{Cof} \alpha t_1 \right), \quad \alpha = \frac{DW}{\pi}, \quad t_1 = \frac{\pi}{D} z_1 \quad (19)$$

und damit wird nach (16)

$$V = \frac{4\pi}{DFW^2} \cdot \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2}{4}} e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} \cos^2 t_1 - e^{-\frac{\alpha\pi}{2}} \mathfrak{Cof} \alpha t_1 \right). \quad (20)$$

Die Potentialfunktion (20) läßt sich auch mittelbar durch Integration der Poissonschen Differentialgleichung

$$\Delta V(v_1) = -4\pi\rho(v_1) = -\frac{8\pi}{F \cdot D} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_1 \cdot e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)} \quad (21)$$

herleiten. Dazu wählen wir als Lösung den Produktansatz

$$V(v_1) = f(z_1) e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)}. \quad (22)$$

Mit Rücksicht auf (21) und (15) gewinnt man zur Bestimmung von $f(z_1)$ die gewöhnliche Differentialgleichung

$$f''(z_1) - W^2 f(z_1) = -\frac{8\pi}{F \cdot D} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_1 \quad (23)$$

mit der Lösungsschar

$$f(z_1) = \frac{4D}{\pi F} \frac{1}{\alpha^2(1 + \frac{1}{4}\alpha^2)} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_1 - M e^{Wz_1} - N e^{-Wz_1} \right). \quad (24)$$

Entsprechend der Symmetrie der Ladungsverteilung ρ müssen wir verlangen, daß auch V und damit $f(z_1)$ symmetrisch zur Ebene $z_1 = 0$ verlaufen. Es muß demnach gelten:

$$f\left(-\frac{D}{2}\right) = f\left(\frac{D}{2}\right) \quad \text{oder} \quad f\left(-\frac{D}{2}\right) = -f\left(\frac{D}{2}\right). \quad (25)$$

Unter diesen Bedingungen stellen wir fest, daß die Integrationskonstanten M und N gleich sein müssen:

$$M = N. \quad (26)$$

Die eine noch unbestimmte Integrationskonstante legen wir durch die konventionelle Forderung fest, daß das Potential unseres Ladungssystems im Unendlichen

verschwindet: Im ladungsfreien Raum außerhalb des Fermigas muß das Potential der Poissongleichung

$$\Delta V_A = 0 \quad (27)$$

genügen. Um die Anschlußbedingungen von V_A an V in x_1 - und y_1 -Richtung zu befriedigen, gehen wir von dem Ansatz aus:

$$V_A = \varphi(z_1) \cdot e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)}. \quad (28)$$

Die allgemeine Lösung lautet mit diesem Ansatz

$$V_A = (\mu e^{Wz_1} + \nu e^{-Wz_1}) \cdot e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)}. \quad (29)$$

Mit Rücksicht auf die Normierungsbedingungen des Potentials sind aber nur folgende Lösungen zulässig:

$$\text{für } z_1 \geq D/2: V_{A+} = \nu e^{-Wz_1} \cdot e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)}, \quad (30)$$

$$\text{für } z_1 \leq -D/2: V_{A-} = \mu e^{Wz_1} \cdot e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)}.$$

Die Potentiale V und V_{A+} (V_{A-}) müssen gemäß den in Betracht kommenden Anschlußbedingungen an der Stelle $z_1 = \frac{D}{2}$ ($z_1 = -\frac{D}{2}$) stetig und differenzierbar ineinander übergehen. Diese Forderung erlaubt die eine noch unbestimmte Integrationskonstante festzulegen. Unser Potential wird damit

$$V(r_1) = \frac{4D}{\pi F} \frac{1}{\alpha^2(1+\frac{1}{4}\alpha^2)} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_1 - e^{-\frac{\alpha\pi}{2}} \mathfrak{C} \mathfrak{D} \{ Wz_1 \} \right) e^{i(k_x x_1 + k_y y_1)}, \quad (31)$$

in Übereinstimmung mit (20).

Mit

$$\psi_r(1) \psi_s^*(1) = \frac{2}{DF} \cos^2 \frac{\pi}{D} z_1 e^{-i(k_x x_1 + k_y y_1)} \quad (32)$$

und (20) bzw. (31) folgt aus (7) durch elementare Integration

$$A_{rs} = \frac{4e^2 D}{F\pi \alpha^2} f(\alpha) \quad (33)$$

mit

$$f(\alpha) = \frac{1 + \frac{3}{8}\alpha^2}{1 + \frac{1}{4}\alpha^2} \left[1 - \frac{1 - e^{-\alpha\pi}}{\alpha\pi(1 + \frac{1}{4}\alpha^2)(1 + \frac{3}{8}\alpha^2)} \right]. \quad (34)$$

Für die Grenzfälle $\alpha \rightarrow 0$ und $\alpha \rightarrow \infty$ gilt:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} f(\alpha) = 0, \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{df}{d\alpha} = \frac{\pi}{2}, \quad (35)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} f(\alpha) = \frac{3}{2}. \quad (36)$$

Das Resultat (33) unterscheidet sich durch den Faktor $f(\alpha)$ von der entsprechenden Größe für den räumlich unbeschränkten Fall.

Literatur

- [1] HARTMANN, H., u. W. ILSE: Z. physik. Chem. (Frankfurt) **11**, 337 (1957).
 [2] MAGNUS, W., u. F. OBERHETTINGER: Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der mathematischen Physik, S. 27. Berlin: Springer 1943.

(Eingegangen am 20. November 1962)