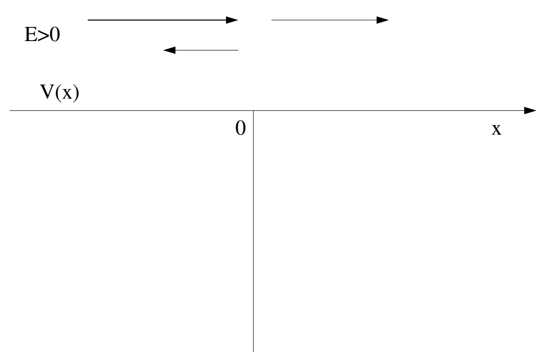
UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Guido Burkard
Dr. Stefan Gerlach
http://tinyurl.com/physik4

Physik IV: Integrierter Kurs (Theoretische Physik)
Sommersemester 2011 - Übungsblatt 6
Ausgabe: 25.05.2011, Abgabe: 01.06.2011, Übungen: 03.06.2011

Aufgabe 13: Streuung am δ-Potential



a) Berechnen Sie die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten $R(E)$ und $T(E)$ von Streuzuständen $(E > 0)$ am eindimensionalen attraktiven δ-Potential

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 k_0}{2m}\,\delta(x)$$

mit $k_0 > 0$ und zeigen Sie, dass $R + T = 1$ gilt.

b) Skizzieren Sie $R(E)$ und $T(E)$.

c) Durch Fortsetzung von $R(E)$ auch für negative Energien, ergibt sich eine Polstelle. Bei welcher Energie liegt diese? Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem gebunden Zustand im attraktiven δ-Potential.

Aufgabe 14: Elektronen in einem periodisches Potential (schriftlich - 10 Punkte)

Um das Verhalten von Leitungselektronen in kristallinen Metallen oder Halbleitern zu beschreiben, geht man von der Vorstellung aus, dass die Elektronen sich in einem durch die Atomrümpfe gebildeten periodischen Potential bewegen.
Hier betrachten wir das einfache Problem von Teilchen in einem eindimensionalen periodischen Potential der Form

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} k_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na), \quad \text{wobei} \quad k_0 > 0,$$

bekannt als *Kronig-Penney-Modell*.
Diese Art von Potential ist für realistische Anwendungen zwar sehr stark vereinfacht, dafür lässt sich das Problem aber exakt lösen und wesentliche Eigenschaften von Teilchen in periodischen Potentialen können daran diskutiert werden.

a) (2 Punkte) Formulieren Sie die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für das Problem. Für die Wellenfunktion $\psi(x)$ im Intervall $(n-1)a < x < na$ soll der Lösungsansatz

$$\psi_k(x) = A_n\, e^{ik(x-na)} + B_n\, e^{-ik(x-na)}$$

gemacht werden. Mit Hilfe der Anschlussbedingungen bei δ-Potentialen bestimmen Sie die Anschlussbedingungen der Wellenfunktionen bei $x = na$.

b) (1 Punkt) Bestimmen Sie damit die Transfermatrix M definiert durch

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

welche die Amplituden A_n und B_n in benachbarten Periodizitätsintervallen ineinander überführt.

Hinweis: Mit $\alpha = \frac{k_0}{2k}$ gilt:

$$M = \begin{pmatrix} (1-i\alpha)e^{ika} & -i\alpha e^{ika} \\ i\alpha e^{-ika} & (1+i\alpha)e^{-ika} \end{pmatrix}.$$

c) (2 Punkte) Berechnen Sie die Eigenwerte $\lambda_\pm$ der Matrix M.
Damit die Amplituden endlich bleiben und die Wellenfunktionen normierbar (d.h. $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(x)^* \psi_{k'}(x)\ \mathrm{d}x = \delta(k-k')$), muss gelten $|\lambda_\pm| = 1$. Zeigen Sie, dass aus der Forderung $|\lambda_\pm| = 1$ folgt, dass für $f(k) = \cos(ka) + \alpha \sin(ka)$ gilt : $-1 \leq f(k) \leq 1$.

d) (2 Punkte) Skizzieren Sie $f(k)$, z.B. für $a = 1$ und $k_0 = 5$. Die Bedingung $-1 \leq f(k) \leq 1$ ist nicht für alle Werte von k erfüllt. Kennzeichnen Sie die "verbotenen" Bereiche von k.

e) (3 Punkte) Verwenden Sie die Exponentialform $\lambda_\pm = e^{\pm iqa}$ um zu zeigen, dass gilt $\cos(qa) = f(k)$.
Die Wellenzahl q bezeichnet man als *Blochvektor* (hier im eindimensionalen Fall). Die erlaubten Bereiche der Bandenergien $E(q) = \frac{\hbar^2 k(q)^2}{2m}$ in d) führen zur Bandstruktur in Festkörpern.
Falls der Vektor $\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$ ein Eigenvektor der Transfermatrix M ist, so nennt man die Funktion

$$\psi_q(x) = A_n\, e^{ik(x-na)} + B_n\, e^{-ik(x-na)}$$

Blochfunktion.
Zeigen Sie damit, dass für die Blochfunktionen gilt $\psi_q(x+a) = e^{iqa}\psi_q(x)$, damit also $|\psi(x)|^2 = |\psi(x+a)|^2$, d.h. dass die beobachtbare Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte invariant gegenüber einer Verschiebungen $x \to x + a$ ist.

Anmerkung: Diese Beziehung gilt nur für Blochfunktionen, aber nicht für beliebige Überlagerungen, da die Transfermatrix nicht unitär, d.h. die Eigenvektoren nicht orthogonal sind.

Aufgabe 15: Knotenregel

Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion als Lösung der stationären Schrödingergleichung im Grundzustand eines eindimensionalen nichtentarteten Systems keine Knoten (Nullstellen innerhalb des Definitionsbereiches) hat.

Hinweis: Argumentieren Sie mit den bekannten Lösungen des unendlichen Potentialtopfes und dem Grenzübergang, wenn die Position beider Wände gegen ∞ bzw. $-\infty$ geht oder durch Widerspruchsbeweis bei Annahme einer endlichen Nullstelle.