Fachbereich Physik
Prof. Dr. Guido Burkard
Dr. Stefan Gerlach
http://tinyurl.com/2019ik4

Universität Konstanz

Physik IV: Integrierter Kurs (Theoretische Physik)
Sommersemester 2019 - Übungsblatt 5
Ausgabe: 15.5., Abgabe: 22.5., Übungen: 24.5.

Aufgabe 12: Der harmonische Oszillator in der Ortsdarstellung (10 Punkte)

Der Hamilton-Operator für einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit der Eigenfrequenz ω lautet

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}.$$

a) (2 Punkte) Geben Sie zunächst die Schrödinger-Gleichung $\hat{H}\psi = E\psi$ für den Hamilton-Operator $\hat{H}$ an. Bringen Sie die Schrödinger-Gleichung in die Form

$$\frac{\mathrm{d}^2\nu(u)}{\mathrm{d}u^2} - 2u\frac{\mathrm{d}\nu(u)}{\mathrm{d}u} + (\eta - 1)\,\nu(u) = 0 \tag{1}$$

mit Hilfe der Substitution $\psi = \exp(-u^2/2)\nu(u)$, wobei $u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und $\eta = \frac{2E}{\hbar\omega}$ ist.

b) (2 Punkte) Um Gl. (1) zu lösen, verwenden Sie einen Potenzreihenansatz

$$\nu(u) = \sum_{\mu=0}^{\infty} a_\mu u^\mu$$

und zeigen Sie durch Koeffizientenvergleich, dass die folgende Rekursionformel gilt

$$a_{\mu+2} = \frac{1}{(\mu+2)(\mu+1)}\left[2\mu - (\eta - 1)\right] a_\mu\,.$$

Damit die Wellenfunktion nicht divergiert für $u \to \pm\infty$, muss die Potenzreihe abbrechen, was genau dann der Fall ist, wenn für die Energieeigenwerte gilt

$$\eta - 1 = 2n, \qquad n = 0, 1, 2, ...$$

Dies liefert genau die bekannten Energieeigenwerte $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

c) (3 Punkte) Die zu verschiedenen Werten von n gehörenden Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind durch die Hermiteschen Polynome

$$H_n(u) = (-1)^n \mathrm{e}^{u^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}u^n} \mathrm{e}^{-u^2}$$

gegeben. Zeigen Sie, dass $\nu(u) = H_n(u)$ tatsächlich eine Lösung ist. Verwenden Sie die Differenzengleichung $H_{n+1} = 2uH_n - 2nH_{n-1}$.

d) (3 Punkte) Berechnen Sie die Normierungskonstante aus der Normierungsvorschrift

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x)\mathrm{d}x = 1.$$

Verwenden Sie die Substitution $u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, partielle Integration und die Formel

$$\frac{\mathrm{d}^n H_n(u)}{\mathrm{d}u^n} = 2^n n!.$$

Geben Sie schließlich die Formel für $\psi_n(x)$ an. Wie lautet die Wellenfunktion des Grundzustands?

Aufgabe 13: Elektronen in einem periodischen Potential (mündlich)

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

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

bekannt als *Kronig-Penney-Modell*.

a) Formulieren Sie die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für das Problem. Für die Wellenfunktion $\psi(x)$ im Intervall $(n-1)a < x < na$ soll der Lösungsansatz $\psi_k(x) = A_n\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)} + B_n\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}$ gemacht werden. Mit Hilfe der Anschlussbedingungen bei δ-Potentialen bestimmen Sie die Anschlussbedingungen der Wellenfunktionen bei $x = na$.

b) 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 $\alpha = \frac{k_0}{2k}$ ist $M = \begin{pmatrix} (1-\mathrm{i}\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & -\mathrm{i}\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \\ \mathrm{i}\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} & (1+\mathrm{i}\alpha)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} \end{pmatrix}$.

c) 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) 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) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator für ein Teilchen im periodischen Potential $V(x) = V(x+a)$ mit dem Translationsoperator T_a (s. Aufgabe 6c)) vertauscht. Das System hat also „Translationssymmetrie“.

f) Zeigen Sie, dass Eigenzustände eines Hamiltonoperators im periodischen Potential die Form

$$\psi(x) = u_k(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

haben, wobei $u_k(x+a) = u_k(x)$, d. h. periodisch ist (*Bloch-Theorem*).

Hinweis: Verwenden Sie $u_k(x) := \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi(x)$.

g) Verwenden Sie die Exponentialform $\lambda_\pm = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}qa}$ 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

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

Blochfunktion.

Zeigen Sie damit, dass für die Blochfunktionen gilt $\psi_q(x+a) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}qa}\psi_q(x)$, 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.