Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik I SS 2021

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Vanessa Gall, Dr. Roland Willa

Blatt 7
Abgabe 11.06.2021

1. Gittermodell eines Festkörpers

In vielen Festkörpern nehmen die Atomkerne feste Gitterpositionen ein, während sich die Elektronen relativ frei in dem dadurch entstehenden periodischen Potential bewegen. Wir betrachten hier ein eindimensionales Beispiel eines solchen Potentials.

a) Betrachten Sie ein periodisches Potential $V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 b\, \delta(x+na)$. Reduzieren Sie den Ansatz $\psi_n(x) = A_n e^{iq(x-na)} + B_n e^{-iq(x-na)}$ für jedes Intervall $na < x < (n+1)a$ auf eine Unbekannte A_0.
Hinweis: Da das Problem mit der diskreten Translation $\hat{\mathcal{T}}_a$ kommutiert, besitzt die gesamte Wellenfunktion die Eigenschaft $\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x)$. Hier wird nur die Stetigkeit und die Periodizität der Wellenfunktion benötigt. Solange k und q als unabhängig betrachtet werden, ist die Bedingung an die Ableitungen überflüssig.

b) Zeigen Sie, dass die zulässigen Werte für $k \in \{-\pi/a, \pi/a\}$ an die Bedingung

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \gamma \frac{\sin(qa)}{qa} \tag{1}$$

geknüpft ist. Beantworten sie zudem (i) wie $q(E)$ von der Energie E der Wellenfunktion abhängt, (ii) welche Form γ besitzt und (iii) wie sich dieser Ausdruck in Abwesenheit des Potentials vereinfacht.

c) Lösen Sie die Bestimmungsgleichung (1) für $\gamma = 0$ (wir erinnern uns $q > 0$ und $k \in [-\pi/a, \pi/a]$). Diskutieren Sie dann für $\gamma > 0$, welche Werte $q_N^{\max}$ weiterhin eine exakte Lösung $k_N^{\max}$ erlauben. Skizzieren Sie die rechte Seite der Gleichung, zeichnen Sie die lösbaren Punkte ein und identifizieren Sie Intervalle $\mathcal{Q}_N = [q_N^{\min}, q_N^{\max}]$ eine Lösung $k(q)$ existiert. Diese Intervalle definieren sogenannte Bänder.

d) Bestimmen Sie $q_N^{\min} = q_{N-1}^{\max} + \delta q_N$ im Grenzfall $\gamma \ll 1$ (es sei $q_0^{\max} = 0$). Berechnen Sie daraus welche E-Werte erlaubt sind (Energie-Bänder) und welche nicht (Bandlücken). Zeichnen Sie die $E(k)$-Beziehung (exakte Punkte exakt, dazwischen qualitativ richtig) und identifizieren Sie darin die Bänder und Bandlücken.

2. Modifiziertes Wasserstoffproblem

Betrachten Sie ein Teilchen im dreidimensionalen Zentralpotential $V(r) = -e^2/r + \gamma/r^2$. Bringen Sie den Hamilton-Operator des Problems auf die Form (3). Führen Sie dazu die Variable s ein, damit das effektive Potential die Form

$$V_{\text{eff}} = -\frac{e^2}{r} + \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2 s\,(s+1)}{r^2} \tag{2}$$

annimmt. Wie hängt s von l und γ ab? Verwenden Sie die in der Vorlesung diskutierte Abbruchbedingung für normierbare Lösungen $u(r)$ mit $R(r) = u(r)/r$ um die erlaubten Energiezustände zu bestimmen.

3. Dreidimensionaler Potentialtopf

In der Vorlesung haben Sie gelernt, dass der Hamiltonian bei einem dreidimensionalen Zentralpotential $V(r)$ auf die Form $\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_r^2 + \hat{\boldsymbol{L}}^2/\hat{r}^2) + V(\hat{r})$ gebracht werden kann wobei $\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$. Dies lässt sich immer durch einen Produktansatz der Form

$$\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3}$$

lösen, wobei Y_{lm} die Kugelflchenfunktionen sind für die $\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$ gilt. Hiermit erhält man für den Radialanteil $R(r)$ die effektiv eindimensionale Bestimmungsgleichung $[\hat{p}_r^2/2m + V_{\text{eff}}(r)]R(r) = ER(r)$, mit $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/2mr^2$. In dieser Aufgabe betrachten wir einen endlichen, dreidimensionalen Potentialtopf, also

$$V(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \tag{4}$$

und suchen gebundene Zustände mit $-U_0 < E < 0$.

a) Der Hamilton-Operator (3) enthält normalerweise erste und zweite Ableitungen der Funktionen $R(r)$. Machen Sie den Ansatz $R(r) = u(r)r^\alpha$ und wählen Sie α so, dass die erste Ableitung verschwindet.

b) Bestimmen Sie aus (3) die Differentialgleichung für $u(r)$ und lösen Sie diese für $l = 0$ in den beiden Bereichen $r > a$ und $r < a$. Wie hängen die Lösungen jeweils von der Energie E ab? *Hinweis:* Berücksichtigen Sie, dass die gesuchte Lösung $R(r)$ in $r = 0$ endlich sein muss und für $x \to \infty$ verschwinden muss.

c) Bei $r = a$ müssen $u(r)$ und $u'(r)$ stetig sein. Notieren Sie beide Stetigkeitsbedingungen und bilden Sie deren Quotienten (die 'logarithmische Ableitung') um die erlaubten gebundenen Energieniveaus zu finden.

d) Finden Sie das niedrigste Energieniveau indem Sie obige Bedingung auf die Form

$$\sin ka = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2U_0}}ka \tag{5}$$

bringen und diskutieren Sie, wann diese Gleichung nicht-triviale Lösungen hat. Gibt es für jedes U_0 einen gebundenen Zustand? *Hinweis:* Drücken Sie den Impuls im Bereich $r > a$ durch den Impuls im Bereich $r < a$ aus und verwenden Sie $\sqrt{1-x^2}/x = \cot[\arcsin(x)]$. Berücksichtigen Sie auch, dass aus der vorherigen Teilaufgabe eine zusätzliche Bedingung an das Vorzeichen von $\cot(ka)$ folgt.