

Moderne Theoretische Physik I SS 2021

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Vanessa Gall, Dr. Roland WillaBlatt 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{T}_a kommutiert, besitzt die gesamte Wellenfunktion die Eigenschaft $\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$. Hier wird nur die Stetigkeit der Wellenfunktion und die aus der Periodizität des Potentials folgende Relation 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

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

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.

Lösungsskizze:

- a) Zunächst bestimmen wir q , indem wir den Ansatz einsetzen. Da die diskreten Punkte, an denen die Deltafunktion nicht null ist, gerade ausgenommen sind, gilt

$$q = \sqrt{2mE/\hbar^2}. \quad (2)$$

Als nächstes betrachten wir die Periodizität. Betrachten wir etwa den Punkt $x = na \pm \epsilon$ für $\epsilon > 0$. Dann ist laut Definition

$$\psi(na + \epsilon) = \psi_n(na + \epsilon) = A_n e^{iq\epsilon} + B_n e^{-iq\epsilon} \quad (3)$$

$$\psi(na - \epsilon) = \psi_{n-1}(na - \epsilon) = A_{n-1} e^{iq(a-\epsilon)} + B_{n-1} e^{-iq(a-\epsilon)} \quad (4)$$

Fordert man die Stetigkeit von ψ bei $x = an$ ergibt sich

$$A_{n-1}e^{iqa} + B_{n-1}e^{-iqa} = A_n + B_n. \quad (5)$$

Aus der Periodizitätsbedingung folgt

$$A_{n+1} = e^{ika} A_n = e^{i(n+1)ka} A_0, \quad (6)$$

$$B_{n+1} = e^{ika} B_n = e^{i(n+1)ka} B_0. \quad (7)$$

Führt man beide Lösungen zusammen ergibt sich zudem

$$B_0 = -A_0 \frac{e^{ika} - e^{iqa}}{e^{ika} - e^{-iqa}}, \quad (8)$$

also insgesamt

$$\psi_n(x) = A_0 e^{inka} \left[e^{iq(x-na)} - \frac{e^{ika} - e^{iqa}}{e^{ika} - e^{-iqa}} e^{-iq(x-na)} \right]. \quad (9)$$

Der Wert von A_0 ergibt sich aus der Normierung und sei hier nicht weiter wichtig.

- b) Auf dem letzten Blatt haben wir gesehen, dass die Ableitung der Wellenfunktion am Delta-Potential nicht stetig ist, sondern einen Knick besitzt, nämlich

$$\psi'(na + \epsilon) - \psi'(na - \epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 b \psi(na) \quad (10)$$

Durch Einsetzen der Wellenfunktion finden wir (O.E.d.A. $n = 1$)

$$\psi'(a + \epsilon) = \psi'_1(a + \epsilon) = A_1 i q \left(1 + \frac{e^{ika} - e^{iqa}}{e^{ika} - e^{-iqa}} \right) \quad (11)$$

$$\psi'(a - \epsilon) = \psi'_0(a - \epsilon) = A_0 i q \left(e^{iqa} + \frac{e^{ika} - e^{iqa}}{e^{ika} - e^{-iqa}} e^{-iqa} \right) \quad (12)$$

also [wir nutzten Gl. (6)]

$$\begin{aligned} i q \left[e^{ika} \left(1 + \frac{e^{ika} - e^{iqa}}{e^{ika} - e^{-iqa}} \right) - \left(e^{iqa} + \frac{e^{ika} - e^{iqa}}{e^{ika} - e^{-iqa}} e^{-iqa} \right) \right] \\ = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 b e^{ika} \left(1 - \frac{e^{ika} - e^{iqa}}{e^{ika} - e^{-iqa}} \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Multipliziert man alles mit dem Nenner $e^{ika} - e^{-iqa}$ erhält man genau

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{mV_0 b a \sin(qa)}{\hbar^2 q a}. \quad (14)$$

Somit ist $\gamma = mV_0 b a / \hbar^2$ [dies beantwortet Frage (ii)] und wir definierten die rechte Seite als $f(q)$. Die Beziehung $q(E)$ [Frage (i)] wurde schon in a) beantwortet. Zu (iii): In Abwesenheit des Potentials ist $\gamma = 0$ und

$$\cos(ka) = \cos(qa). \quad (15)$$

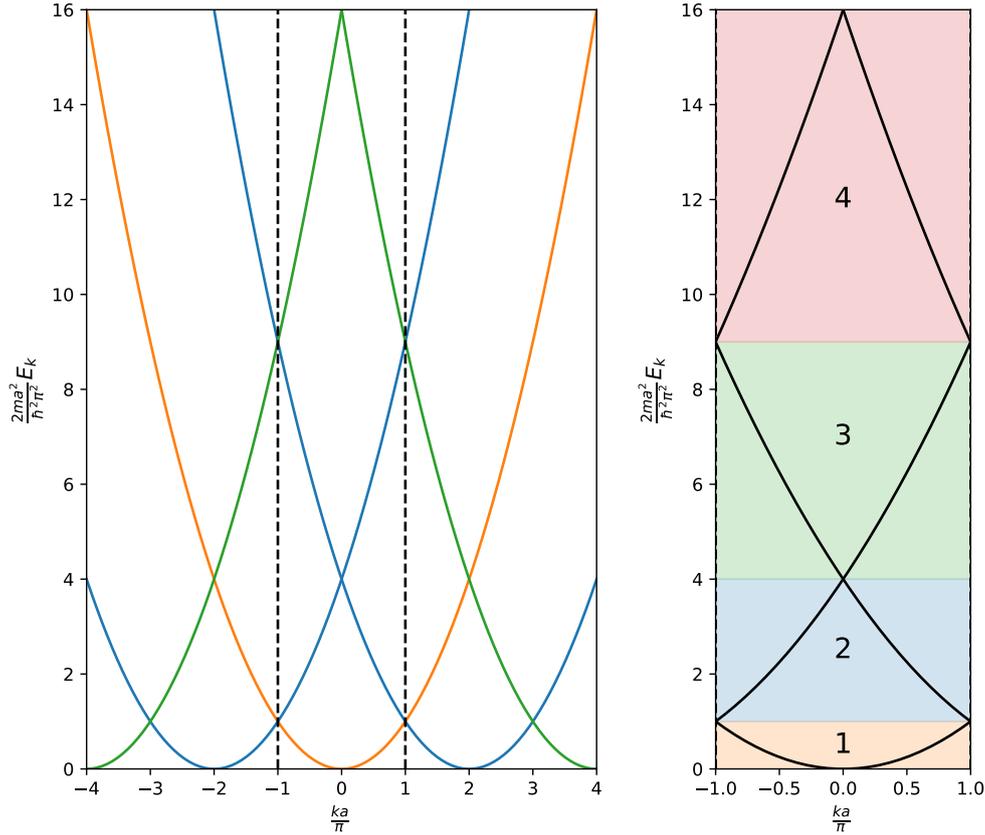


Abbildung 1: Links: Parabolische Dispersion im erweiterten Zonenschema (Scheitelpunkte bei Vielfachen von $(2\pi/a)$). Gestrichelte Linien begrenzen die erste Brillouin Zone. Rechts: Kristallimpuls in der ersten Brillouinzone. Nach jedem Schnittpunkt beginnt ein neues Band. Jede Energie besitzt einen zugehörigen Zustand k : Es gibt also keine Bandlücken.

- c) Für $\gamma = 0$ findet man also aus Gl. (15), dass $k = \pm[q - (2\pi/a)(N - 1)]$ mit $N \in \mathbb{N}$ der Bandindex. Wir erkennen, dass für jeden q -Wert zwei k -Zustände existieren, welche man durch 'zurückfalten' in die erste Brillouin-Zone, d.h. $k \in [-\pi/a, \pi/a]$ erhält, siehe Abbildung 1. Hier ist die Beziehung zwischen der Energie E und dem (Kristall)-Impuls k gegeben durch $E_N(k) = \hbar^2[|k| + (2\pi/a)(N - 1)]^2/2m$. Die Schar von Energiewerten für festes N bilden ein Energie-Band. Ohne Potential, berühren ein Band die jeweils benachbarten Bänder bei $k = \pm\pi/a$ und $k = 0$, d.h. bei $q_N = (\pi/a)N$ wo Gl. (15) die Werte ± 1 liefert.

Für $\gamma > 0$ muss beachtet werden, dass der Wertebereich der linken Seite von Gl. (1) durch ± 1 beschränkt ist, also können Lösungen $k(q)$ nur existieren wenn

$$\left| \cos(qa) + \gamma \frac{\sin(qa)}{qa} \right| \leq 1. \quad (16)$$

Exakt lösbar ist die Gleichung für $q_N = (\pi/a)N$ wo der zweite Term rechts verschwindet und der erste Term $(-1)^N$ ist. Des weiteren beobachtet man, dass $\lim_{q \rightarrow 0} f(q) = 1 + \gamma > 1$ $\lim_{x \rightarrow 0} \sin(x)/x = 1$. Aus der Stetigkeit von $f(q)$ schliessen wir, dass die Oszillierende Funktion bei $q_N = (\pi/a)N$ jeweils über den Wert $(-1)^N$ 'hinausschiesst'. Damit markiert $q_N = q_N^{\max}$ die obere Kante eines Energiebands. Gleichzeitig muss es jeweils eine weitere Schnittstelle bei $q_N^{\min} = q_{N-1}^{\max} + \delta q_N$ geben. Für $\gamma \ll 1$ gilt auch $\delta q_N a \ll 1$, im Allgemeinen ist jedoch $\delta q_N a < \pi/a$. Ein Plot von $f(q) = \cos(qa) + \gamma \frac{\sin(qa)}{qa}$ ist in Abb. 2 für $\gamma = 0$ und $\gamma = 2$ gegeben.

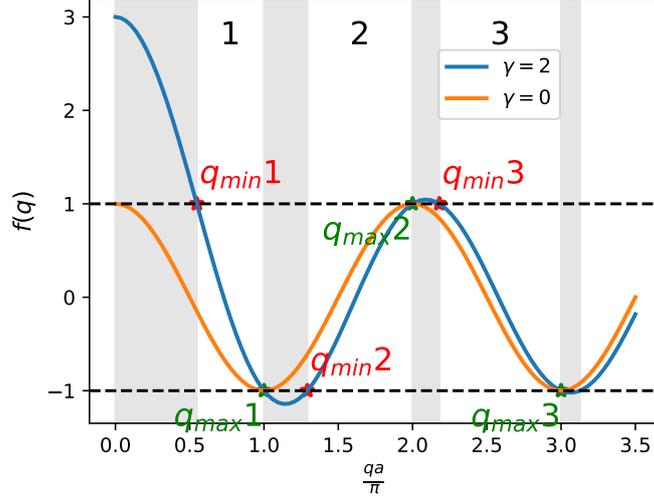


Abbildung 2: Plot der rechten Seite von Gl. (1) für $\gamma = 2$ in blau und für $\gamma = 0$ in orange. Im blauen Fall gibt es für die grauen Bereiche keine Lösung. Im Rahmen der Festkörperphysik werden diese grauen Bereiche Bandlücken genannt.

- d) In den grau hinterlegten Bereichen gibt es keine Lösung für $k(q)$ und somit kein $k(E)$. Die hellen Bereiche wo eine Lösung existiert, enden immer bei $q_N^{\max} = N\pi/a$ wo der Term, der das Potential V_0 spürt genau verschwindet. Dies entspricht den Band-Berührungspunkten $k \in \{0, \pm\pi/a\}$ im Fall ohne Potential. Um diese Bandlücken zu identifizieren müssen wir noch q_N^{\min} bestimmen, welche durch $f(q_N^{\min}) = (-1)^{N-1}$ charakterisiert ist. Für $\gamma \ll 1$ ist $\delta q_N = q_N^{\min} - q_{N-1}^{\max}$ klein, d.h. mit $\delta q_N a \ll 1$. Eine Entwicklung der trigonometrischen Funktionen liefert

$$\cos(q_N^{\min} a) \approx (-1)^{N-1} \left[1 - \frac{(\delta q_N a)^2}{2} \right], \quad (17)$$

$$\sin(q_N^{\min} a) \approx (-1)^{N-1} \delta q_N a. \quad (18)$$

Somit gilt (für $N > 1$)

$$f(q_N^{\min}) \approx (-1)^{N-1} \left[1 - \frac{(\delta q_N a)^2}{2} + \gamma \frac{\delta q_N}{q_{N-1}^{\max}} \right], \quad (19)$$

und wir finden

$$\delta q_N a = \frac{2\gamma}{q_{N-1}^{\max} a} = \frac{2\gamma}{(N-1)\pi} \quad (20)$$

Die N te Bandlücke beginnt bei einer Energie $E_N = E(q_N^{\max}) = \hbar^2(N\pi/a)^2/2m = E_1 N^2$ welche quadratisch mit N ansteigt. Gleichzeitig ist die N te Energielücke

$$\Delta E_N = E(q_{N+1}^{\min}) - E(q_N^{\max}) = (4\gamma/\pi^2) E_1 \quad (21)$$

unabhängig von N . Im ersten Band findet man $q_1^{\min} a = \sqrt{2\gamma}$ und das Band wird bei $k = 0$ angehoben um

$$\Delta E_0 = E(q_1^{\min}) = (2\gamma/\pi^2) E_1. \quad (22)$$

Die hieraus entstehende Bandstruktur ist in 3 zu sehen.

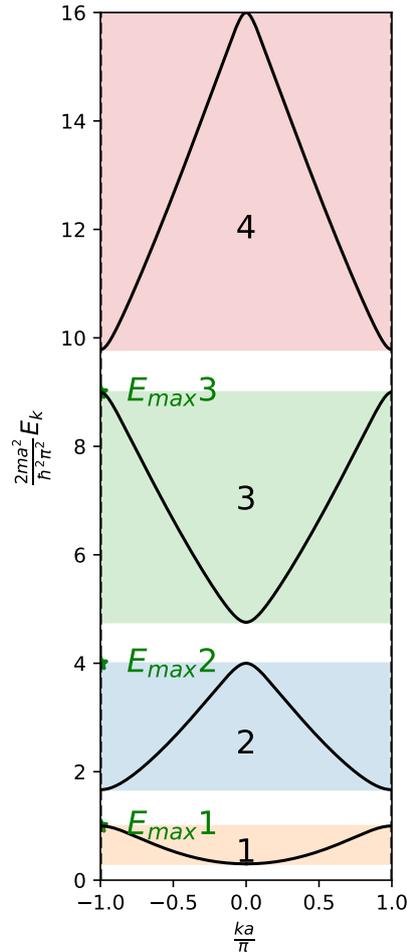


Abbildung 3: Der δ -Kamm verbiegt die Bänder (siehe Abb. 1) in der Nähe der Kreuzungspunkte. Nicht jede Energie besitzt einen zugehörigen Zustand k : Es gibt Bandlücken. Die Breite der Bänder nimmt mit N zu, diejenige der Lücken bleibt näherungsweise konstant!

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

$$V_{\text{eff}} = -\frac{e^2}{r} + \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 s(s+1)}{r^2} \quad (23)$$

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.

Lösungsskizze:

Man erhält Gleichung (3) mit

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{\gamma}{r^2} \quad (24)$$

Für

$$\frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 s(s+1)}{r^2} = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} + \frac{\gamma}{r^2} \quad (25)$$

hat dies exakt die gleiche Form wie das Wasserstoffproblem aus der Vorlesung. Es ist

$$s = \pm \sqrt{l(l+1) + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}} + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} = \pm \frac{1}{2} \left(\sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8m\gamma}{\hbar^2}} - 1 \right) \quad (26)$$

Wir können die Rechnung der Vorlesung jetzt verwenden, indem wir die Substitution $l \rightarrow s$ verwenden. Definiert man wie im Skript $n = \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{-2E}}$, so lautet die Abbruchbedingung nun, dass

$$p \equiv n - s - 1 \quad (27)$$

eine ganze Zahl ist. Mit $n = p + s + 1$ erhalten wir die Eigenenergien

$$E_p = -\frac{e^4 m^2}{2\hbar^2} n(p)^{-2} = -\frac{2e^4 m^2}{\hbar^2} \left(2p + 1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8m\gamma}{\hbar^2}} \right)^{-2}, \quad (28)$$

welche nun vom Drehimpuls l abhängen. Der Grund dafür liegt darin, dass der Hamiltonian nicht mehr mit dem Laplace-Runge-Lenz Vektor kommutiert.

3. Dreidimensionaler Potentialtopf

In der Vorlesung haben Sie gelernt, dass der Hamiltonian bei einem dreidimensionalen Zentralpotential $V(r)$ auf die Form $\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_r^2 + \hat{\mathbf{L}}^2/\hat{r}^2) + V(\hat{r})$ 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

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (29)$$

lösen, wobei Y_{lm} die Kugelflächenfunktionen sind für die $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$ 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

$$V(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (30)$$

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

- 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.
- 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 $x \rightarrow \infty$ verschwinden muss.
- 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.
- Finden Sie das niedrigste Energieniveau indem Sie obige Bedingung auf die Form

$$\sin ka = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2 U_0}} ka \quad (31)$$

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.

Lösungsskizze:

a) Man erhält

$$\hat{p}_r^2 u(r) \cdot r^\alpha = -\hbar^2 \left(\alpha(\alpha+1)r^{\alpha-2}u(r) + 2(\alpha+1)r^{\alpha-1} \frac{\partial u(r)}{\partial r} + r^\alpha \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} \right). \quad (32)$$

Für $\alpha = -1$ verschwindet der Term mit der ersten Ableitung und man erhält

$$\hat{p}_r^2 \frac{u(r)}{r} = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} \right). \quad (33)$$

b) Mit dem Ergebnis der vorherigen Aufgabe bringt man (3) auf die Form

$$\left(\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + V_{\text{eff}}(r) \right) \frac{u(r)}{r} \quad (34)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} + V(r) \frac{u(r)}{r} + \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \frac{u(r)}{r} = E \frac{u(r)}{r} \quad (35)$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} + V(r)u(r) + \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} u(r) = Eu(r). \quad (36)$$

Für $l = 0$ und das gegebene $V(r)$ erhält man eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung.

Bereich $r < a$:

In diesem Bereich erhält man

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - U_0 u(r) = Eu(r). \quad (37)$$

Dies wird gelöst durch $u(r) = e^{\pm ikr}$ mit $k = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}$, wobei $E + U_0 > 0$ für gebundene Zustände. Damit die Lösung $R(r)$ für $r = 0$ nicht divergiert, wählen wir

$$u(r) = c_1 \sin(kr), \quad \rightarrow R(r) = c_1 \frac{\sin(kr)}{r} \quad (38)$$

Bereich $r > a$:

In diesem Bereich erhält man

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} = Eu(r). \quad (39)$$

Dies wird gelöst durch $u(r) = e^{\pm \kappa r}$ mit $\kappa = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$, wobei $E < 0$ für gebundene Zustände. Damit die Lösung $R(r)$ für $r \rightarrow \infty$ normierbar ist, wählen wir

$$u(r) = c_2 e^{-\kappa r}, \quad \rightarrow R(r) = c_2 \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (40)$$

c) Für die Stetigkeit von $u(r)$ ergibt sich

$$c_1 \sin(ka) = c_2 e^{-\kappa a} \quad (41)$$

und für die Ableitung

$$c_1 k \cos(ka) = -c_2 \kappa e^{-\kappa a}. \quad (42)$$

Um die erlaubten Energieniveaus zu bestimmen bilden wir den Quotienten dieser Ausdrücke und erhalten

$$\frac{k}{\tan(ka)} = -\kappa \quad (43)$$

d) Zunächst verwenden wir

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(U_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})}{\hbar^2}} = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - k^2 a^2}. \quad (44)$$

Damit schreibt sich die Stetigkeitsbedingung

$$k \cot(ka) = -\kappa = -\frac{1}{a} \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - k^2 a^2} \quad (45)$$

$$\Leftrightarrow \cot(ka) = \frac{\sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - k^2 a^2}}{-ka} \quad (46)$$

$$= \frac{\sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}} \sqrt{1 - \left(\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right)^2}}{-ka} \quad (47)$$

$$= \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right)^2}}{\frac{-k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}} = \cot \arcsin\left(-\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right) \quad (48)$$

$$\Leftrightarrow ka + n\pi = \arcsin\left(-\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right) \quad (49)$$

$$\Leftrightarrow \sin(ka) = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 a^2}} ka. \quad (50)$$

Gleichzeitig folgt aus $\cot(ka) = -\kappa/k$, dass $\cot(ka) < 0$. Dies trifft im Intervall $0 < ka < \pi$ genau auf den Bereich $\pi/2 < ka < \pi$ zu. Nun suchen wir das minimale k , das diese Bedingungen löst. Da konstante Lösungen nicht normierbar sind, ist $k = 0$ keine relevante Lösung. Es gibt nicht immer eine Lösung für diese Bestimmungsgleichung, da die Steigung $\frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 a^2}}$ so hoch sein kann, dass der Schnittpunkt im Bereich $0 < ka < \pi/2$ liegt. Die maximale Steigung, bei der es einen Schnittpunkt gibt, ist gerade durch $ka = \pi/2$ gekennzeichnet. Hier gilt

$$1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 a^2}} \frac{\pi}{2} \Leftrightarrow U_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}. \quad (51)$$

Für flachere Potentialtöpfe gibt es keine gebundenen Zustände.