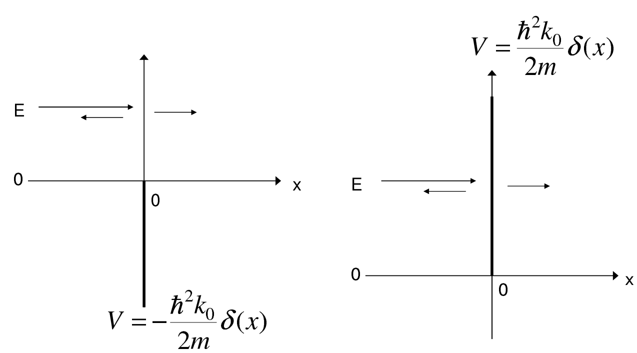
UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Georg Maret (Experimentalphysik)
Raum P 1009, Tel. (07531)88-4151
E-mail: Georg.Maret@uni-konstanz.de
Prof. Dr. Matthias Fuchs (Theoretische Physik)
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: Matthias.Fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Physik IV: Integrierter Kurs
Sommersemester 2009
Übungsblatt 6, Ausgabe 03. 06. 2009
Abgabe am 10. Juni 2009
Besprechung in den Übungen am 10. und 12. 06. 2009

Aufgabe 29 (E): Reflexion und Transmission am δ-Potential (6 Punkte)



a) (3 P.) Berechnen Sie die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten $R(E)$ und $T(E)$ von Streuzuständen ($E > 0$) am attraktiven bzw. repulsiven δ-Potential in einer Dimension.

b) (1 P.) Weisen Sie $R + T = 1$ nach.

c) (2 P.) Diskutieren Sie, dass Sie dasselbe Ergebnis für $T(E)$ erhalten, wenn Sie in den Formeln aus Aufgabe 23c bzw. 25b den Topf unendlich tief / die Schwelle unendlich hoch, aber infinitesimal schmal werden lassen, also $|V_0| \to \infty$ und $2a \to 0$, aber so, dass $2a|V_0|$ konstant bleibt, nämlich $2a|V_0| = \frac{\hbar^2 k_0}{2m}$.

Aufgabe 30 (E): Gebundene Zustände im doppelten δ-Potential (10 Punkte)

Betrachten Sie, wiederum in einer Dimension, das Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} K_0(\delta(x+a) + \delta(x-a)).$$

Es sollen die gebundenen Zustände untersucht werden.

a) (3 P.) Setzen Sie in allen drei Regionen, $x \leq -a$, $-a \leq x \leq a$, $x \geq a$, Wellenfunktionen der Art $\exp(\pm\kappa x)$ bzw. Kombinationen an und stellen Sie die Stetigkeitsbedingungen auf. Beweisen Sie, dass κ

$$\begin{aligned} \kappa(1+\tanh(\kappa a)) &= -K_0 \quad \text{(gerade Zustände)} && (1) \\ \text{oder} \qquad \kappa(1+\coth(\kappa a)) &= -K_0 \quad \text{(ungerade Zustände)} && (2) \end{aligned}$$

erfüllt. Skizzieren Sie die Wellenfunktionen.

b) (2 P.) Zeigen Sie, dass $y(1+\tanh y)$ für $y \geq 0$ monoton steigend ist, sowie dass $y(1+\coth y)$ für $y \geq 0$ monoton steigend und immer ≥ 1 ist.
Unterscheiden Sie jetzt die Fälle $K_0 a \geq 0$, $-1 \leq K_0 a < 0$ und $K_0 a < -1$ und geben Sie an, wieviele gebundene Zustände jeweils existieren. Begründen Sie Ihre Antwort.

c) (1 P.) Benutzen Sie die Tatsache, dass $\tanh y < \coth z$ für beliebige $y, z \geq 0$, um zu zeigen, dass die κ der geraden Lösungen größer als die der ungeraden sind. Was bedeutet dies für die Energieeigenwerte?

d) (3 P.) Zeigen Sie durch Entwickeln der Funktionen in $\exp(-\kappa a)$ um $a = \infty$, also um $\exp(-\kappa a) = 0$, dass sich tanh und coth für sehr große a als

$$\tanh(\kappa a) \approx 1 - 2\exp(-2\kappa a) \qquad \text{bzw.} \qquad \coth(\kappa a) \approx 1 + 2\exp(-2\kappa a)$$

nähern lassen.
Welchen Wert nehmen die κ der geraden und ungeraden Lösungen für unendlich großen Abstand a an? Skizzieren Sie auch für diesen Fall die Wellenfunktionen.
Setzen Sie in

$$\kappa(1 \pm \exp(-2\kappa a)) = -K_0/2 \qquad (*)$$

im Exponenten die nullte Näherung für große a, also $\kappa = -K_0/2$ ein, vor der Klammer jedoch nicht, und lösen Sie nach κ auf. Setzen Sie dann abermals in (*) im Exponenten das jetzige Ergebnis für κ ein und lösen nochmals nach dem Faktor κ vor der Klammer auf. (Dies soll Ihnen ein iteratives Verfahren aufzeigen, für großes, aber nicht unendliches a die κ und damit die Energieeigenwerte ausrechnen zu können.)
e) (1 P.) Warum gibt es für $a \to 0$, aber endliches K_0, keine ungerade Lösung?
Nähern Sie für kleine a für die geraden Lösungen $\tanh(\kappa a) \approx \kappa a$ in (1), berechnen Sie κ im Grenzfall $a \to 0$ und vergleichen Sie mit den Ergebnissen aus d).

Aufgabe 31 (E): Hermitesche Polynome (4 Punkte)

Sie haben gelernt, dass die stationäre Schrödingergleichung für den harmonischen Oszillator $(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)\Psi(x) = E\Psi(x)$ durch

$$\Psi_n(\xi) = \frac{1}{(2^n n!)^{1/2}\pi^{1/4}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

mit $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$ gelöst wird.

a) (2 P.) Zeigen Sie, dass gilt: $\sqrt{n+1}\Psi_{n+1}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{d}{d\xi} + \xi)\Psi_n(\xi)$.

b) (2 P.) Benutzen Sie Ihr Wissen, dass $H_n(\xi)$ ein entweder rein gerades oder rein ungerades Polynom mit dem führenden Term $(2\xi)^n$ ist, um zu beweisen, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \; \Psi_n(\xi) \; \xi \; \Psi_m(\xi) = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1}$$

ist. Hilfe: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$.

Aufgabe 32 (T): Harmonischer Oszillator I (schriftlich - 10 Punkte)

Für den harmonischen Oszillator gegeben durch

$$H = \hbar\omega(a^+ a + \frac{1}{2})$$

mit

$$[a, a^+] = 1$$

und der aus der Vorlesung bekannten orthonormierten Basis von Eigenzuständen $|n\rangle$ zu den Eigenwerten $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ für $n = 0, 1, 2, \dots$.

a) (2 Punkte) Berechnen Sie $a|n\rangle$, $a^+|n\rangle$, $\langle n|a$, $\langle n|a^+$ mit

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle.$$

b) (2 Punkte) Finden Sie die allgemeinste lineare Transformation $a = \alpha x + \beta p$, so dass x und p als Orts- und Impulsoperatoren die kanonische Vertauschungsrelation $[x, p] = i\hbar$ erfüllen. Wie lässt sich weiter erreichen, dass $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2$ wird?

c) Der harmonische Oszillator befinde sich im Zustand

$$|\psi\rangle = N\{|1\rangle + \sqrt{2}|2\rangle + \sqrt{6}|3\rangle\}$$

mit den Eigenzuständen $|n\rangle$ zur Energie $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

- a) (1 Punkt) Berechnen Sie die Normierungskonstante N.
- b) (1 Punkt) Wie entwickelt sich $|\psi\rangle$ zeitlich?
- c) (2 Punkte) Wie lautet die Wahrscheinlichkeit $p_n(t)$ im Zustand $|\psi\rangle$ die Energie E_n zu messen? Und wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $p(t)$, dass jede Einzelmessung der Energie zu Zeiten $t > 0$ ein Ergebnis liefert, das größer ist als $2\hbar\omega$?

d) (2 Punkte) Wie lautet der Erwartungswert des Ortsoperators x im Zustand $|\psi\rangle$ für $t > 0$?

Aufgabe 33 (T): Elektronen in einem periodischen 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 realsitische 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

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

gemacht werden. Mit Hilfe der in den Aufgaben 29 und 30 diskutierten Anschlussbedingungen für die Wellenfunktion 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. $<\psi_k|\psi_{k'}>= \delta(k-k')$), 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. Die erlaubten Bereiche der Bandenergien $E(q) = \frac{\hbar^2 k(q)^2}{2m}$ führen zur Bandstruktur in Festkörpern.

d) (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). 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 $x \rightarrow x + a$ 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.