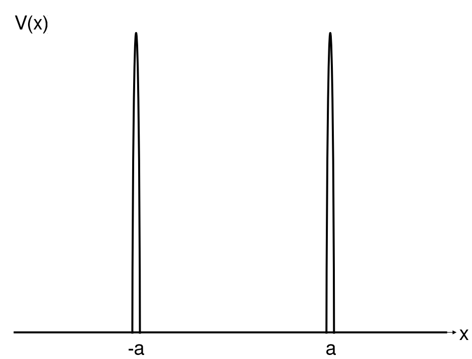
UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Elke Scheer (Experimentalphysik)
Raum P 1007, Tel. 4712
E-mail: elke.scheer@uni-konstanz.de
Prof. Dr. Guido Burkard (Theoretische Physik)
Raum P 807, Tel. 5256
E-mail: Guido.Burkard@uni-konstanz.de

Übungen zur Physik IV: Integrierter Kurs - Sommersemester 2010
Übungsblatt 7, Ausgabe 31. 05. 2010
Abgabe am 07. und 09. 06. 2010
Besprechung in den Übungen am 09. und 11. 06. 2010

Aufgabe 36 (E): Gebundene Zustände im doppelten δ-Potential (schriftl. - 6 Punkte)



a) Betrachten Sie in einer Dimension das Potential

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

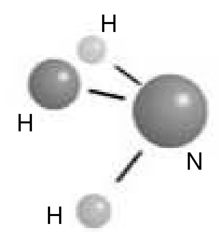
Setzen Sie in allen drei Regionen, $x \leq -a$, $-a \leq x \leq a$ und $x \geq a$, Wellenfunktionen der Art $\exp(\pm\kappa x)$ bzw. Kombinationen aus solchen an und stellen Sie die Anschlussbedingungen auf (für die Ableitung der Wellenfunktion benutzen Sie die in Aufgabe 37a) angegebene Eigenschaft).
Beweisen Sie, dass

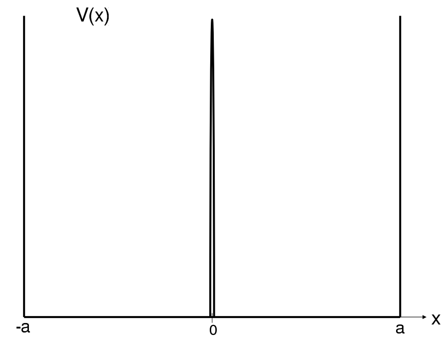
$$\begin{aligned} \kappa(1+\tanh(\kappa a)) &= -k_0 \qquad \text{wenn die Wellenfunktion gerade ist,} \\ \text{und} \quad \kappa(1+\coth(\kappa a)) &= -k_0 \qquad \text{wenn die Wellenfunktion ungerade ist.} \end{aligned}$$

Skizzieren Sie eine gerade und eine ungerade Wellenfunktion.

b) 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.
Wie hätte man das Potential in der Abbildung sinniger zeichnen sollen?
Für welches physikalische System ist das Doppel-δ-Potential ein grob vereinfachtes Modell?

Aufgabe 37 (E): Ammoniak-Molekül





Wenn wir sagen, dass beim Ammoniakmolekül NH_3 die drei Wasserstoffatome eine Ebene festlegen, gibt es für das Stickstoffatom zwei mögliche Positionen, nämlich auf der einen oder anderen Seite dieser Ebene. Das Stickstoffatom kann von einer auf die andere Seite tunneln. Als grob vereinfachtes Modell betrachten wir das Potential aus Sicht des N-Atoms als einen eindimensionalen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden und einer Barriere (δ-Potential) zwischen den beiden Hälften (siehe Bild und Aufgabenteile b bis d).

a) Betrachten Sie als Vorbereitung in einer Dimension ein einzelnes δ-förmiges Potential

$$V(x) = V_0\delta(x) \qquad \text{mit} \quad V_0 = \frac{\hbar^2}{2m}k_0.$$

Zeigen Sie, dass eine Lösung $\Psi(x)$ der stationären Schrödingergleichung überall als stetig angenommen werden kann, jedoch ihre Ableitung bei $x = 0$ eine Sprung der Größe $k_0\Psi(0)$ macht, also

$$\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = k_0\Psi(0)$$

ist. Integrieren Sie dazu die Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

über x von $-\varepsilon$ bis ε und betrachten Sie den Limes $\varepsilon \to 0$.

b) Betrachten Sie jetzt das gezeichnete Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}k_0\delta(x) + \begin{cases} 0 & \text{falls } |x| \le a \\ \infty & \text{falls } |x| > a \end{cases} \qquad \text{mit} \quad k_0 > 0.$$

Mit Ihrem Wissen über die Eigenzustände des rechteckigen unendlich tiefen Potentialtopfes geben Sie hier die ungeraden Wellenfunktionen (also diejenigen negativer Parität) und die zugehörigen Energieeigenwerte an.

c) Gehen Sie für die geraden Lösungen (also diejenigen positiver Parität) von dem Ansatz

$$\Psi(x) = \begin{cases} A\ \sin(kx + \varphi) & \text{falls } \ 0 \le x \le a \\ A\ \sin(-kx + \varphi) & \text{falls } \ -a \le x \le 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

aus, wobei A eine Amplitude und φ eine zunächst beliebige Phase ist. Leiten Sie aus Rand- und Anschlussbedingungen eine Bestimmungsgleichung für den Parameter ka her.

d) Welche Werte nimmt für die geraden Lösungen aus c) ka an für die Extremfälle $k_0 a \to \infty$ bzw. $k_0 a \to 0$? Wie lauten in diesen Fällen die zugehörigen Energieeigenwerte? Vergleichen Sie mit den Energieeigenwerten der ungeraden Lösungen.

Aufgabe 38 (E): Wellenpaket im Oszillatorpotential

Ein Teilchen der Masse m bewege sich im Oszillatorpotential

$$V(q) = \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$$

(q ist die Ortskoordinate. Die Bezeichnung x kann dann als dimensionslose Ortskoordinate verwendet werden.) Zur Zeit t=0 werde das Teilchen durch die Wellenfunktion

$$\Psi(q,0) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(q-\overline{q})^2\right)$$

beschrieben ($\overline{q}$ ist ein beliebiger, aber fester Wert, die Mitte des anfänglichen Wellenpakets).

a) Entwickeln Sie $\Psi(q,0)$ nach den Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

$$\varphi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_n(x) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

mit den Hermite-Polynomen H_n, x=$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q$ und den zugehörigen Energieeigenwerten E_n=$\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$. Das heißt, berechnen Sie die Koeffizienten α_n in

$$\Psi(q,0) = \sum_n \alpha_n\, \varphi_n(q).$$

Folgende nützliche Formel dürfen Sie verwenden:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\;\; H_n(x)\;\; \exp\left(-(x-x_0)^2\right) = \sqrt{\pi}\,(2x_0)^n \qquad (*)$$

b) Stellen Sie die zeitabhängige Wellenfunktion $\Psi(q,t)$ auf. Mit der Eigenschaft

$$\sum_0^\infty \frac{y^n}{n!} H_n(x) = \exp\left(-y^2 + 2xy\right)$$

(die rechte Seite ist eine sogenannte erzeugende Funktion, also hier diejenige für die Hermite-Polynome; das wollen wir hier jedoch nicht beweisen) finden Sie eine Darstellung von $\Psi(q,t)$, die keine Summe $\sum_n$ mehr enthält.

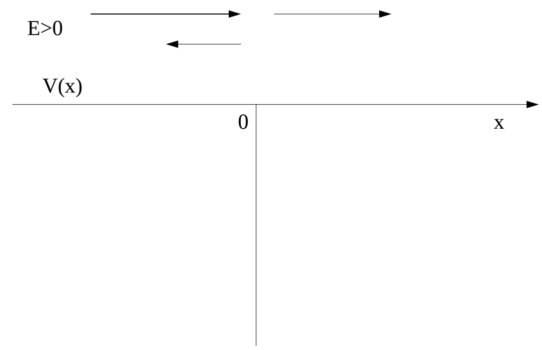
c) Berechnen Sie $|\Psi(q,t)|^2$ und bringen dies in eine Form, der man ansieht, dass es sich um eine Verteilung exakt der Form wie $|\Psi(q,0)|^2$ handelt, in der lediglich statt $\overline{q}$ eine zeitlich oszillierende Koordinate steht. Das Wellenpaket ändert seine Form also nicht, und fließt insbesondere auch nicht auseinander. Mit welcher Frequenz bewegt es sich im Raum hin und her?

d) Beweisen Sie die Beziehung (*) aus b) mit vollständiger Induktion und der Darstellung der Hermite-Polynome

$$H_n(x) = \exp\left(\frac{x^2}{2}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

$\int_{-\infty}^{\infty} dx\;\exp(-x^2) = \sqrt{\pi}$ dürfen Sie als bekannt voraussetzen.

Aufgabe 39(T): 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 40(T): 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

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

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. Die erlaubten Bereiche der Bandenergien $E(q) = \frac{\hbar^2 k(q)^2}{2m}$ führen zur Bandstruktur in Festkörpern.

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). 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 41(T): Wronski-Determinante und Transfermatrix

a) Zeigen Sie für die eindimensionale Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

dass die zugehörende *Wronski-Determinante*

$$W(\psi_1, \psi_2) = \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_2 \\ \psi_1' & \psi_2' \end{vmatrix} = \psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2$$

zweier Lösungen die folgenden Eigenschaften besitzt:

i) $W(\psi_1, \psi_2)$ ist eine Konstante, wenn ψ_1 und ψ_2 Lösungen zu demselben E sind.

ii) $W(\psi_1, \psi_2)$ ist Null für linear abhängige Lösungen ψ_1 und ψ_2.[1]

b) Betrachten Sie ein Potential mit $V(x \to \pm\infty) = V_\pm < \infty$. Beweisen Sie die Reziprozität der Transmission:
Der über die Ströme definierte Transmissionskoeffizient T_r für eine Welle, die das Potential von rechts nach links durchläuft, ist gleich dem Transmissionskoeffizient T_l für eine von links nach rechts laufende Welle.

Hinweis: Der Transmissionskoeffizient ist gegeben durch $T = j_{trans.}/j_{ein.}$. Um die Ströme zu bestimmen, machen Sie sinnvolle Ansätze für jeweils eine von links bzw. rechts einfallende Welle. Eine der oben gezeigten Eigenschaften der Wronski-Determinante ist in diesem Teil hilfreich.

c) Indem Sie die Rechnung von b) mit der *Transfermatrix* $\mathcal{M}$ schreiben, zeigen Sie, dass $\mathcal{M}$ allgemein die Form

[1] Die Umkehrung gilt i.A. nicht, d.h. aus $W(\psi_1, \psi_2) = 0$ folgt nicht die lineare Abhängigkeit von ψ_1 und ψ_2.

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} u & v \\ v^* & u^* \end{pmatrix}$$

mit $u, v \in \mathbb{C}$ hat, wobei gilt

$$|u|^2 - |v|^2 = \sqrt{\frac{E - V_+}{E - V_-}}.$$

Hinweis: Verwenden Sie die folgende Beziehung

$$\mathcal{M}^\dagger g \mathcal{M} = \sqrt{\frac{E - V_+}{E - V_-}} g$$

mit $g = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.