Lehrstuhl für Theoretische Physik II
U. Eckern

Übungen zur Theoretischen Festkörperphysik I — WS 2007/08
Blatt 1: Wiederholungen aus der Quantenmechanik

1. Diskutieren Sie die Eigenschaften des Translationsoperators

$$\hat{T}_a = \exp(ia\hat{p}).$$

Wie wirkt dieser Operator explizit in der Ortsdarstellung?

2. Betrachten Sie ein Teilchen auf dem Intervall $0 \ldots L$; die potentielle Energie sei gleich null. Bestimmen Sie die Energie-Eigenwerte und die Eigenfunktionen für verschiedene Randbedingungen.

   (a) Periodische Randbedingungen

   (b) Feste Randbedingungen (unendlich hohe Wände bei 0 und L)

   Bestimmen Sie die Zustandsdichte

$$N(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

   im Grenzfall $L \to \infty$.

3. Gegeben sei ein $N-$dimensionaler Vektorraum mit den orthonormierten Basisvektoren $|i\rangle$. Bestimmen Sie die stationären Zustände der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

   für den Hamiltonoperator, der gegeben ist durch die Matrixelemente

$$H_{ik} = \langle i|\hat{H}|k\rangle = \varepsilon\delta_{ik} - w(\delta_{i,k+1} + \delta_{i,k-1}).$$

   Hierbei sind ε und w reelle, positive Konstanten. Zudem sollen die Komponenten $\psi_i = \langle i|\psi\rangle$ der periodischen Randbedingung $\psi_i = \psi_{i+N}$ unterliegen.

4. Gegeben sei die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + K\delta(x)\psi = E\psi. \tag{1}$$

   (a) Eine für alle x gültige Lösung muß bei $x = 0$ stetig sein, und ihre Ableitung $\psi'(x)$ muß bei $x = 0$ die folgende Sprungbedingung erfüllen:

$$\lim_{\epsilon\to 0}(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) = \frac{2mK}{\hbar^2}\psi(0). \tag{2}$$

   Leiten Sie die Sprungbedingung (2) aus Gleichung (1) her.

(b) Welche physikalische Bedeutung haben Lösungen von (1) für negative Energie E? Bestimmen Sie die möglichen Energie-Eigenwerte $E < 0$ und die zugehörige normierte Lösung $\psi(x)$ für die Fälle $K > 0$ (abstoßendes) und $K < 0$ (anziehendes Potential).
Hinweis: Lösen Sie (1) zunächst separat für $x < 0$ und $x > 0$.

(c) Bestimmen Sie die Lösungen $\psi_k(x)$ von (1) zu positiver Energie $E = \hbar^2 k^2/2m$ $(k > 0)$ mit den Randbedingungen:

$$\psi_k(x) \to \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx} & \text{für } x \to -\infty, \\ Be^{ikx} & \text{für } x \to \infty. \end{cases} \tag{3}$$

Geben Sie A und B explizit als Funktion von k an und verifizieren Sie die Relation

$$|A|^2 + |B|^2 = 1. \tag{4}$$

(d) Welche physikalische Situation wird durch die Lösungen $\psi_k(x)$ beschrieben, und was bedeuten die Größen $|A|^2$, $|B|^2$ und die Relation (4) anschaulich? Wie würde sich ein Teilchen in der analogen Situation nach der klassischen Mechanik verhalten?

5. *Das Kronig-Penney-Modell*
Wir betrachten die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung mit folgendem Potential:

$$V(x) = v \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - an), \quad v > 0.$$

a ist die Gitterkonstante dieses eindimensionalen Gitters. Zur Vereinfachung betrachten wir das System auf einem Ring angeordnet, also mit periodischen Randbedingungen $\psi(x) = \psi(x + Na)$ mit $N \in \mathcal{N}$. Das Bloch-Theorem sagt aus, daß für eine Wellenfunktion in einem periodischen Potential gelten muß:

$$\psi(x) = e^{ikx}\phi_k(x) \quad \text{mit } \phi_k(x) = \phi_k(x + a),$$

wobei k noch zu bestimmen ist. $\phi_k(x)$ ist gitterperiodisch.Das Bloch-Theorem läßt sich auch schreiben als $\psi(x + a) = e^{ika}\psi(x)$.

(a) Zeigen Sie, daß durch die Randbedingungen k ein ganzzahliges Vielfaches von $2\pi/Na$ sein muß.

(b) Begründen Sie den allgemeinen Ansatz $\psi(x) = a_n e^{iqx} + b_n e^{-iqx}$ für das n-te Segment des Gitters, d.h. $na < x < (n + 1)a$. Die neuen Parameter q, a_n, b_n müssen noch bestimmt werden. Sie sind mit k verknüpft. Wie hängt die Energie von q ab?

(c) Leiten Sie jetzt mit Hilfe des Bloch-Theorems folgende Formeln für die a_n und b_n her: $a_{n+1} = a_n e^{i(k-q)a}$ und $b_{n+1} = b_n e^{i(k+q)a}$.

(d) Mit den Anschlußbedingungen zwischen dem n-ten und $n+1$-ten Segment lassen sich zwei weitere Formeln herleiten. Eliminieren Sie mit Teil (c) die a_{n+1} und b_{n+1} aus diesen Formeln, und lösen Sie das Gleichungssystem, das nun nur noch a_n und b_n enthält.

(e) Das Gleichungssystem hat nur Lösungen für

$$\cos ka = \cos qa + \frac{mv}{\hbar^2 q} \sin qa.$$

Versuchen Sie, daraus verbotene Bereiche, Energiebänder und Energielücken abzuleiten (eine vollständige analytische Lösung ist nicht möglich). Interpretieren Sie k und q. Wie sieht die Energie $E(k)$ aus (qualitativ)?

6. Gegeben sei der Hamiltonoperator des eindimensionalen, harmonischen Oszillators:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2.$$

(a) Wie sieht $\hat{H}$ in der Ortsdarstellung aus, wenn man $\hat{x}$ substituiert durch $\hat{x}' = \sqrt{m\omega/\hbar}\hat{x}$ und die Kommutatorrelation $[\hat{x}', \hat{p}'] = i\hbar$ weiterhin erhalten ist. Wir nennen diese reduzierten Größen im weiteren wieder $\hat{x}$ und $\hat{p}$.

(b) a und $a^\dagger$ seien Linearkombinationen von $\hat{x}$ und $\hat{p}$. Wir fordern $[a, a^\dagger] = 1$. Außerdem soll $\hat{H}$ als Funktion von a und $a^\dagger$ eine möglichst einfache Form besitzen. Dies ist dann erreicht, wenn die Terme a^2 und $(a^\dagger)^2$ in $\hat{H}$ verschwinden. Bestimmen Sie damit, über welche Koeffizienten die a und $a^\dagger$ von $\hat{x}$ und $\hat{p}$ abhängen.

(c) Berechnen Sie die Matrixelemente für die Operatoren a, $a^\dagger$, $\hat{x}$, $\hat{p}$ in der Basis der Energieeigenzustände.

(d) Bestimmen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie für einen Energieeigenzustand.

(e) Berechnen Sie die Wellenfunktion der Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators in der Impulsdarstellung.

7. Die Pauli-Matrizen sind definiert durch :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Bestimmen Sie die Spur und die normierten Eigenzustände von

$$\vec{\omega}\vec{\sigma} := \omega_x\sigma_x + \omega_y\sigma_y + \omega_z\sigma_z,$$

wobei $\vec{\omega} \in R^3$ und $\omega = |\vec{\omega}| = 1$.

8. Für Spin-1/2 Systeme ist der Drehimpulsoperator

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}.$$

(a) Zeigen Sie für $\vec{\omega} \in R^3$:

$$\begin{aligned}\exp(-i\vec{\omega}\mathbf{S}/\hbar) &= \exp(-i\vec{\omega}\vec{\sigma}/2), \\ &= \cos(\omega/2) - i\vec{\omega}\vec{\sigma}\frac{\sin(\omega/2)}{\omega}.\end{aligned}$$

Hinweis: Es ist nützlich $(\vec{\omega}\vec{\sigma})^2$ auszurechnen.

(b) Es sei $|z_\pm\rangle$ der Eigenzustand zu σ_z zum Eigenwert ± 1. Zeigen sie, daß

$$\begin{aligned}\sigma_x|\psi_\pm\rangle &= \pm|\psi_\pm\rangle \text{ falls } |\psi_\pm\rangle = e^{-i\sigma_y\pi/4}|z_\pm\rangle, \\ \sigma_y|\psi_\pm\rangle &= \pm|\psi_\pm\rangle \text{ falls } |\psi_\pm\rangle = e^{i\sigma_x\pi/4}|z_\pm\rangle.\end{aligned}$$

9. Zwei "eindimensionale" Fermionen der Masse m und des Spins 1/2 haben die Wechselwirkung

$$W(x_1, x_2) = \frac{1}{4}m\omega^2(x_1 - x_2)^2.$$

Bestimmen Sie die Niveaus der Singulett- und Triplettzustände.