Lehrstuhl für Theoretische Physik II
U. Eckern

Übungen zur Theoretischen Festkörperphysik I — WS 2007/08
Blatt 4

1. Bloch-Theorem: Zeigen Sie explizit mit Hilfe der stationären 1-Teilchen-Schrödingergleichung, dass die Wellenfunktion eines Teilchens in einem periodischen Potential von der folgenden Form ist:
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad .$$
Hier ist $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ eine gitterperiodische Funktion, d. h. $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, wobei $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, $\{n_j\} = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ Die 3 Vektoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ sind linear unabhängig (nicht notwendigerweise orthogonal) und erzeugen das Gitter.

   (a) Betrachten Sie periodische Randbedingungen. Welche $\mathbf{k}$-Werte sind erlaubt?

   (b) Entwickeln Sie dann das periodische Potential und die Wellenfunktion nach ebenen Wellen, und zeigen Sie explizit, dass die Wellenfunktion von der obigen Form ist.

2. Klassische lineare Kette: Betrachten Sie eine lineare Anordnung von Teilchen der Masse M, die über Federn (Federkonstante: K) verbunden sind. Der Gleichgewichtsabstand zweier Teilchen sei a, d. h. die Position des n-ten Teilchens ist $x_n = na + y_n$. Die Länge des Systems sei $L = Na$ (periodische Randbedingungen).

   (a) Stellen Sie die Lagrange- und die Hamilton-Funktion auf. Leiten Sie daraus die Bewegungsgleichungen her.

   (b) Finden Sie die Lösungen der Bewegungsgleichung. Bestimmen Sie das Frequenzspektrum ω_q und daraus die Gruppengeschwindigkeit.

   (c) Berechnen Sie die Zustandsdichte $D(\omega) = \sum_q \delta(\omega - \omega_q)$ im Grenzfall $L \to \infty$.

   (d) Schreiben Sie die Hamilton-Funktion um auf die Fourier-transformierten Größen
$$y_q = N^{-1/2} \sum_n \mathrm{e}^{-iqna} y_n,$$
$$p_q = N^{-1/2} \sum_n \mathrm{e}^{+iqna} p_n.$$

   (e) Zeigen Sie: $p_q = p_{q+g}$, $y_q = y_{q+g}$, mit $g = 2\pi/a$.

3. Quantenmechanische lineare Kette: Gehen Sie über zu den entsprechenden Operatoren.

   (a) Ausgehend von den bekannten Kommutatoren für die p_n's und y_n's: Bestimmen Sie die Kommutatoren der p_q's und y_q's.

   (b) Führen Sie die „üblichen“ Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein:
$$y_q = \left(\frac{\hbar}{2M\omega_q}\right)^{1/2} (a^+_{-q} + a_q)$$
$$p_q = i\left(\frac{M\hbar\omega_q}{2}\right)^{1/2} (a^+_q - a_{-q})$$
   Leiten Sie die Kommutatoren der a's und a^+'s her.

(c) Schreiben Sie den Hamilton-Operator mit Hilfe der a's und a^+'s um.

4. Lineare Kette mit zwei verschiedenen Massen (M_1 und M_2), die alternieren: Wie groß ist jetzt die Einheitszelle? Bestimmen Sie klassisch wiederum das Frequenzspektrum und diskutieren Sie das Resultat. Wie lassen sich die quantenmechanischen Überlegungen der vorherigen Aufgabe übertragen?

5. Die einfache lineare Kette im langwelligen Grenzfall. Neue Notation: $na \to x$, $y_n(t) \to y(x,t)$. Betrachten Sie $a \to 0$.

   (a) Bestimmen Sie die Lagrange-Funktion. Resultat:

   $$L = \int dx \left[\frac{1}{2}\rho\dot{y}^2 - \frac{1}{2}k{y'}^2\right] \quad .$$

   Hierbei ist $\dot{y} = \partial y/\partial t$ und $y' = \partial y/\partial x$. Indentifizieren Sie ρ und k. Bestimmen Sie die Bewegungsgleichung und ihre Lösungen.

   (b) Bestimmen Sie mit der Hilfe der üblichen Prozedur daraus die Hamilton-Funktion. Nennen Sie, zur besseren Unterscheidung, die Impulsdichte $\Pi(x,t)$. (Wie hängt dieses Π mit dem obigen p_n zusammen?) Schreiben Sie dann die Hamilton-Funktion mit Hilfe der Fourier-transformierten Variablen um – direkt im Kontinuumsgrenzfall!

   (c) Wie gestaltet sich der Übergang zur Quantentheorie? Mit anderen Worten: Was ist für den Kommutator $[\Pi(x), y(x')]$ anzusetzen?

   (d) Betrachten Sie den Fall, dass die Kette an einem Punkt ($x = 0$) mit einem zeitlichen δ-Puls angeregt wird. Lösen Sie dazu die geeignet ergänzte Bewegungsgleichung mit Hilfe einer Fourier-Transformation bezüglich Raum und Zeit. Führen Sie dann die Rücktransformation durch, zuerst bezüglich der Frequenz (wobei ein geeigneter – kleiner – Dämpfungsterm eingeführt werden muss, der die Kausalität garantiert).