Theoretische Physik IV: Quantenmechanik

(Vorlesung Prof. Dr. J. Timmer)

Aufgabenzettel Nr. 8

Vorwort

Das vorliegende Aufgabenblatt behandelt den für die Festkörperphysik wichtigen Fall periodischer Potentiale. In Aufgabe 2 soll das Energiespektrum eines Teilchens in einem periodischen Potential mit endlichen Potentialstufen bestimmt werden. Im Gegensatz zu dem in der Vorlesung behandelten Dirac-Kamm, wo die Anschlussbedingungen auf die Determinante einer 2×2-Matrix führen, ist für das Potential mit endlichen Stufen die Determinante einer 4×4-Matrix zu bestimmen. Der damit verbundene Rechenaufwand lässt sich unter Zuhilfenahme allgemeiner Eigenschaften von Fundamentalsystemen, Aufgabe 1, umgehen.

Aufgabe 1: Fundamentalsystem und Wronski-Determinante **(9 Pkt.)**

In der Vorlesung wurde das Floquet-Bloch-Theorem gezeigt, d.h. die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

eines Teilchens im periodischen Potential $V(x)$ mit Periode a hat Lösungen der Form

$$\psi(x) = e^{iqx}u(x), \tag{2}$$

mit einer a-periodischen Funktion u, d.h. $u(x+a) = u(x)$.

i.) Zeigen Sie, dass aus Gl. (2) der Ausdruck $\psi(x+a) = e^{iqa}\psi(x)$ folgt. **(1 Pkt.)**

ii.) Das System $\{\varphi_1(x,E), \varphi_2(x,E)\}$ von Lösungen der stationären Schrödingergleichung zum Energiewert E heißt Fundamentalsystem, wenn sich jede Lösung in der Form $\psi(x) = \sum_{l=1}^{2} A_l\varphi_l(x)$ schreiben lässt. Zeigen Sie, dass die Wronski-Determinante

$$\Delta(x) := \det \underbrace{\begin{pmatrix} \varphi_1(x) & \varphi_2(x) \\ \varphi_1'(x) & \varphi_2'(x) \end{pmatrix}}_{M(x)}$$

für Lösungen φ_1 und φ_2 von Gl. (1) unabhängig von x is, d.h. $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Delta(x) = 0$. **(2 Pkt.)**

iii.) Ein mögliches Fundamentalsystem ist durch die Anfangsbedingung

$$\begin{aligned} \varphi_1(0) =& 1, \qquad \varphi_1'(0) = 0, \\ \varphi_2(0) =& 0, \qquad \varphi_2'(0) = 1, \end{aligned} \tag{3}$$

festgelegt. Zeigen Sie für dieses System, dass die Forderung $\psi(x+a) \overset{!}{=} \lambda\psi(x)$, vgl. Teil i.), äquivalent zu dem Eigenwertproblem

$$M(a)\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} \overset{!}{=} \lambda \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} \tag{4}$$

ist. **(3 Pkt.)**

iv.) Wir haben gezeigt, dass aufgrund des Floquet-Bloch-Theorems die Eigenwerte $\lambda_{1/2}$ der Matrix $M(a)$ von der Gestalt $\lambda_i = e^{iq_i a}$ sind. Zeigen Sie, dass $\lambda_2 = \lambda_1^*$ gelten muss und nutzen Sie diesen Zusammenhang zwischen den Eigenwerten, um

$$\gamma(E) := \frac{1}{2}\Big(\varphi_1(a;E) + \varphi_2'(a;E)\Big) = \cos(qa) \tag{5}$$

zu folgern. **(2 Pkt.)**

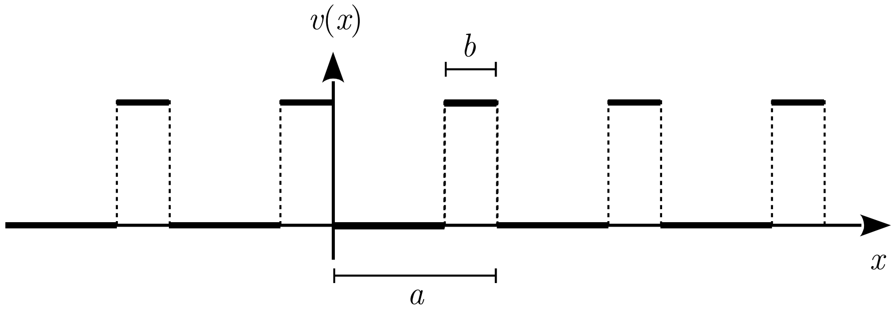
v.) Die Eigenwerte $\lambda_i = e^{iq_i a}$ müssen aufgrund des Satzes von Floquet und Bloch Betrag 1 haben. Warum ist diese Bedingung automatisch durch unsere spezielle Wahl des Fundamentalsystems erfüllt? **(1 Pkt.)**
Hinweis: Machen Sie sich die Wronski-Determinante zunutze.

Aufgabe 2: Periodisches Kastenpotential **(6 Pkt.)**

Gegeben sei das a-periodische Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{, falls } 0 \le x < a - b, \\ v_0 & \text{, falls } a - b \le x < a, \end{cases}$$

mit $v_0 > 0$, $0 < b < a$, und periodisch fortgesetzt, siehe Skizze.



i.) Bestimmen Sie das Fundamentalsystem $\{\varphi_1(x;E), \varphi_2(x;E)\}$ für die Schrödingergleichung, Gl. (1), mit dem periodischen Kastenpotential $V(x)$ für die Anfangsbedingungen wie in Gl. (3). Beachten Sie dabei die Anschlussbedingungen bei $x = a - b$. **(3 Pkt.)**

ii.) Bestimmen Sie $\gamma(E)$ wie in Gl. (5),

$$\text{Zwischenergebnis:}\quad \gamma(E) = \cos\big((a-b)f(E)\big)\cdot\cos\big(bg(E)\big) - \frac{1}{2}\left(\frac{f(E)}{g(E)} + \frac{g(E)}{f(E)}\right)\sin\big((a-b)f(E)\big)\cdot\sin\big(bg(E)\big),$$

mit $f(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ und $g(E) = \frac{\sqrt{2m(E-v_0)}}{\hbar}$. Plotten Sie $\gamma(E)$ für $\frac{b}{a} = \frac{1}{10}$, $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ und $\frac{v_0}{E_0} = 60$ und markieren Sie die zugelassenen Energiebereiche. **(3 Pkt.)**

Münsteraufgabe

Bischhofskirchen haben zwei Türme. Freiburg ist Bischofssitz. Warum hat das Münster nur einen Turm?