Theoretische Physik II: Quanten Mechanik, Übung 7

Prof. Hans Peter Büchler WS 2009, 1. Dezember 2009

1. **Kronig–Penney Model (Schriftlich)**

   Eine einfache Modellierung der elektronischen Eigenschaften in Festkörpern kann mit dem Kronig–Penney Modell realisiert werden. Eine wichtige Eigenschaft sind die sogenannten Energiebänder, dicht liegende diskrete Energieniveaus, die durch „verbotenen Zonen" von einander getrennt werden, in denen keine stationären elektronischen Zustände erlaubt sind. Mit Hilfe dieses einfachen Bändermodells können verschiedene Festkörper als Isolator, Halbmetall oder Metall klassifiziert werden. Die Ursache für die Entstehung der Energiebänder liegt zum einen an der streng periodischen Anordung der Atome im Festkörper und zum anderen an quantenmechanischen Tunnelprozessen der Elektronen von einem Atom zum anderen. Im folgenden nehmen wir deshalb eine eindimensionale periodische Anordnung von δ–Potentialen an

   $$V(x) = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$$

   wobei $g > 0$ eine Kopplungskonstante und a die Gitterkonstante des Kristalls beschreiben.

   (a) Zeige zunächst dass sich dieses Potential aus einer Aneinanderreihung von Potentialtöpfen der Tiefe V_0 und der Breite a, die durch eine Barriere der Breite b voneinander getrennt sind, herleiten lässt. Betrachte hierzu den Limes $b \to 0$ bei fester Kopplungskonstante $g = bV_0$.

   (b) Finde für die Bereiche

   $$na < x < n(a+1), \quad n \in \mathbb{N}$$

   die Lösung der Schrödinger Gleichung und bestimme die Stetigkeitsbedingungen an den kritischen Punkten $x = na$

   (c) Zeige mit Hilfe der Symmetrie Eigenschaften des Hamiltonoperators dass die Lösung der Schrödingergleichung dem Bloch Theorem genügt

   $$\psi_q(x) = u_q(x)e^{iqx} \qquad\qquad u_q(x+a) = u_q(x)$$

   und bestimme die möglichen k Werte für einen Festkörper mit endlichem Volumen, was durch periodische Randbedingungen in unserem eindimensionalen Modell ereicht werden kann.

   (d) Verwende das Bloch Theorem um die Koeffizenten der allgemeinen Lösungen in den einzelnen Bereichen zwischen den δ–Potentialen zu bestimmen und auf zwei Koeffizenten

   $$\alpha_n = \alpha_0 e^{iqna} \qquad\qquad \beta_n = \beta_0 e^{iqna}$$

zurück geführt werden können. Bestimme α_0 und β_0 aus den Stetigkeitsbedingungen

(e)* Benutze die Ergebnisse aus Aufgabenteil (d) um die erlaubten und verbotenen Bereiche der Elektronenenergien zu bestimmen. Skizziere die Dispersionsrelation $E(q)$ für $q = 0, 1, 2$ des Kronig Penney Modell und diskutiere den Einfluss der Kopplungskonstante g und der Gitterkonstante a auf die Bandstruktur (q–Kurvenschar) und interpretiere die verschiedenen Fälle physikalisch.

2. Darstellungen des Drehimpulses (Schriftlich)

Um zu einer Darstellung des Drehimpulses zu gelangen, definieren wir Erzeuger und Vernichter, die den bosonischen Vertauschungsrelationen gehorchen

$$J_z = \frac{1}{2}(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) \qquad J_+ = a_+^\dagger a_- \qquad J_- = a_-^\dagger a_+$$

(a) Zeige, dass damit die Drehimpulsvertauschungsrelationen folgen,

$$\left[J_z, J_\pm\right] = \pm J_\pm \qquad \left[J_+, J_-\right] = 2J_z$$

und das

$$J^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}J_+J_- + \frac{1}{2}J_-J_+ = N(N+1)$$

gilt.

(b) Berechne die Matrixelemente von J_+, J_- und J_z in der Eigenbasis von $\hat{N} = \hat{n}_+ + \hat{n}_-$ mit $\hat{n}_+ = a_+^\dagger a_+$ und $\hat{n}_- = a_-^\dagger a_-$.
(Tipp: Berechne explizit die Wirkung der Operatoren auf die Basisvektoren:

$$\begin{aligned} J_+ \left|n_+, n_-\right\rangle &= \sqrt{n_-(n_+ + 1)}\left|n_+ + 1, n_- - 1\right\rangle \\ J_- \left|n_+, n_-\right\rangle &= \sqrt{n_+(n_- + 1)}\left|n_+ - 1, n_- + 1\right\rangle \\ J_z \left|n_+, n_-\right\rangle &= (n_+ - n_-)/2\left|n_+, n_-\right\rangle \end{aligned}$$

)

Zeige, dass für

$$j = \frac{1}{2}(n_+ + n_-) \qquad m = \frac{1}{2}(n_+ - n_-)$$

die Matrixelemente die bekannte Form annehmen (siehe QM–Skript Kapitel 4.3)

(c) Mit Hilfe der Erzeuger $a^\dagger$ und Vernichter a lassen sich alle Darstellungen (j, m) der $SU(2)$ erzeugen. Stelle die Eigenvektoren $|j, m\rangle$ mit Hilfe von $a^\dagger$ und a und dem „Vakuumszustand" $|0, 0\rangle$ dar

3. Wigner Formel für die Rotationsmatrizen* (Übungsstunde)

Mit Hilfe der (j, m)–$SU(2)$ Darstellung des Drehimpulses können die Rotationsmatrizen der räumlichen Drehungen in der Basis $|j, m\rangle$ dargestellt werden. Da jede Drehung aus $SO(3)$ zerlegt werden kann in Drehungen um die Euler'schen Winkel

$R = R_z(\varphi)R_y(\vartheta)R_z(\psi)$ genügt es, die Darstellung einer Rotation um die y–Achse zu bestimmen, $D(R_y(\vartheta) = e^{-i\vartheta J_y}$. Der rotierte Basisvektor wird

$$D(R)\,|j,m\rangle = \frac{\left(D(R)a_+^\dagger D^{-1}\right)^{j+m}\left(D(R)a_-^\dagger D^{-1}\right)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} D(R)\,|0,0\rangle \tag{1}$$

(a) Zeige unter Verwendung der Vertauschungsrelationen, dass $a^\dagger$ und a wie folgt transformieren

$$D(R)\,a_\pm^\dagger\,D^{-1}(R) = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)a_\pm^\dagger \pm \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)a_\mp^\dagger$$

(b) Für den rotierenden Basisvektor können wir die Wigner Formel (siehe (2)) herleiten.

$$\begin{aligned}
D(R_y(\vartheta))\,|j,m\rangle &= \sum_{m'} d^j_{m'm}(\vartheta)\,|j,m'\rangle \\
d^j_{m'm}(\vartheta) &= \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(j-k-m')!(k-m+m')!} \\
&\quad \times \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)^{2k-m+m'}
\end{aligned} \tag{2}$$

Benutze das Ergebnis aus Aufgabenteil (a) und setze dies in Gleichung (1) ein, um Gleichung (2) herzuleiten.