Arbeitsblatt 8 10.12.2019

Einfache Potentiale II

Auf diesem Übungsblatt werden Sie sich mit weiteren wichtigen einfachen Potentialen beschäftigen. Aufgabe 1 behandelt periodische Potentiale, welche in der Festkörperphysik eine wichtige Rolle spielen. In Aufgabe 2 untersuchen Sie den fundamental wichtigen harmonischen Oszillator, der teilweise auch in der modernen Forschung als einfaches Modellsystem Verwendung findet. Aufgabe 3 verallgemeinert das Streuproblem an einer Potentialstufe vom letzten Übungsblatt auf drei Raumdimensionen. Lassen Sie sich nicht von der Länge des Übungsblattes abschrecken. Diese ist in großen Teilen auf zusätzliche Texte zur Erklärung zurückzuführen, die zum reinen Durchrechnen der Aufgabe nicht unmittelbar benötigt werden.

Aufgabe 1: Periodische Potentiale (10 Punkte)

Viele Festkörper besitzen eine periodische Gitterstruktur. Um einen Festkörper vollständig zu beschreiben, müsste man theoretisch die Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung aller Protonen, Neutronen und Elektronen unter Berücksichtigung ihrer Wechselwirkung untereinander lösen. Dies ist ein unlösbares Problem. Häufig ist es jedoch eine sehr gute Näherung, davon auszugehen, dass die positiv geladenen Atomkerne ein unbewegliches Gitter bilden. Aufgrund der periodischen Struktur bewegen sich die Elektronen dann in einem periodischen Potential. Vernachlässigt man außerdem die Wechselwirkung der Elektronen untereinander und beschränkt sich auf eine Dimension, so reduziert sich das Problem auf die Lösung einer Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen, was Inhalt dieser Aufgabe ist. Betrachten Sie also ein periodisches Potential, d.h. ein Potential für das

$$V(x+na) = V(x),\ n \in \mathbb{Z}, \tag{1}$$

gilt, wobei $a \in \mathbb{R}$ den Abstand zweier Gitterpunkte bezeichnet. Wir wollen zunächst einige allgemeine Eigenschaften dieses Potentials betrachten.

(a) Stellen Sie zunächst die stationäre Schrödinger-Gleichung für das Potential (1) auf. Zeigen Sie, dass diese invariant unter der Transformation $x \mapsto x + na$, $n \in \mathbb{Z}$ ist, d.h. falls $\psi(x)$ eine Lösung ist, so ist auch $\psi(x + na)$, $n \in \mathbb{Z}$ eine Lösung.

(b) Eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung besitzt zwei linear unabhängige Lösungen. Seien nun $\phi_1(x)$ und $\phi_2(x)$ zwei solche Lösungen der Schrödingergleichung zu einem festen Eigenwert $E \in \mathbb{R}$. Jede Linearkombination von $\phi_1(x)$ und $\phi_2(x)$ ist dann ebenfalls eine Lösung zum Eigenwert E. Begründen Sie, warum die Gleichungen

$$\phi_1(x+a) = c_{11}\phi_1(x) + c_{12}\phi_2(x) \tag{2}$$
$$\phi_2(x+a) = c_{21}\phi_1(x) + c_{22}\phi_2(x) \tag{3}$$

gelten, wobei $c_{ij} \in \mathbb{C}$, $i, j = 1, 2$ beliebige Konstanten sind.

(c) Zeigen Sie, dass für eine beliebige Wellenfunktion $\psi(x)$ die Relation

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \psi(x+na) = \lambda^n\psi(x)\ \forall n \in \mathbb{Z} \tag{4}$$

gilt, wobei $\lambda \in \mathbb{C}$.

(d) Zeigen Sie, dass es genau zwei linear unabhängige Lösungen $\psi_{1/2}(x)$ der Schrödinger-Gleichung zum Eigenwert E gibt, welche beide Seiten von (4) erfüllen. (*Hinweis: Drücken Sie $\psi_{1/2}(x)$ als Linearkombination der $\phi_{1/2}(x)$ aus und nutzen Sie deren Eigenschaften.*)

(e) Beweisen Sie nun mit Hilfe der Ergebnisse aus den vorangegangenen Teilaufgaben, dass sich alle Lösungen, die beide Seiten von (4) erfüllen, in der Form

$$\psi_{1/2}(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} u_k^{1/2}(x) \tag{5}$$

schreiben lässt, wobei $u_k^{1/2}(x+a) = u_k^{1/2}(x)$ eine gitterperiodische Funktion ist, die von der genauen Form des Potentials abhängt und $|k| \leq \frac{\pi}{a}$.

Die Gleichung (5) wird als Bloch-Theorem bezeichnet und spielt in der Festkörperphysik eine wichtige Rolle, z.B. bei der Berechnung von Bandstrukturen. Wir wollen dies nun an einem konkreten Potential untersuchen. Betrachten Sie dazu das Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m}\Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x+na) \tag{6}$$

mit $\Omega \in \mathbb{R}$.

(f) Nutzen Sie die Ergebnisse aus den vorangegangenen Aufgabenteilen um die Energieeigenwerte, sowie die Wellenfunktionen zum Potential (6) zu bestimmen.

Aufgabe 2: Harmonischer Oszillator (10 Punkte)

In dieser Aufgabe wollen wir das quantenmechanische Analogon zum klassischen harmonischen Oszillator betrachten. Dieses Quantensystem beschreibt sehr viele praktische Situationen wie z.B. Teilchen in Ionenfallen oder Laser. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung ist in diesem Fall gegeben durch

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x) = E\Psi(x). \tag{7}$$

(a) Führen Sie die dimensionslosen Variablen $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ und $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$ ein um die Schrödingergleichung zu vereinfachen. Überlegen Sie sich, wie sich die Lösung der Schrödingergleichung für große ξ verhalten muss und geben Sie hierfür eine Näherungslösung an.

(b) Begründen Sie mit Hilfe Ihres Resultats aus Teilaufgabe (a), warum sich der Ansatz

$$\Psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{8}$$

zur Lösung der Schrödingergleichung eignet. Leiten Sie daraus eine Differentialgleichung für $h(\xi)$ her und lösen Sie diese mit dem Potenzreihenansatz $h(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j$. Folgern Sie aus der so erhaltenen Rekursionsformel eine Darstellung für die geraden und ungeraden Koeffizienten.

(c) Vereinfachen Sie die Rekursionsformel für große j und zeigen Sie, dass hiermit die Koeffizienten genähert werden können durch $a_j \approx \frac{C}{(j/2)!}$ (C ist eine beliebige Konstante). Argumentieren Sie hiermit, wieso die Potenzreihe ab einem gewissen Wert $j = n$ abbrechen muss, damit die Wellenfunktion normierbar bleibt.

(d) Folgern Sie aus der Rekursionsformel, dass für ein beliebiges n die Gleichung $K = 2n + 1$ gilt und dass $a_0 = 0$ für ungerade n und $a_1 = 0$ für gerade n. Bestimmen Sie hiermit die Energieeigenwerte E_n.

Aufgabe 3: Reflexion und Transmission einer Materiewelle (10 Punkte)

Viele ungewöhnliche Effekte von Materie können mit Hilfe der Quantenmechanik erklärt werden, in welcher diese auch Welleneigenschaft besitzt. Ziel dieser Aufgabe ist der Vergleich von Materiewellen mit allgemeinen Eigenschaften von Lichtwellen anhand eines einfachen Beispiels.

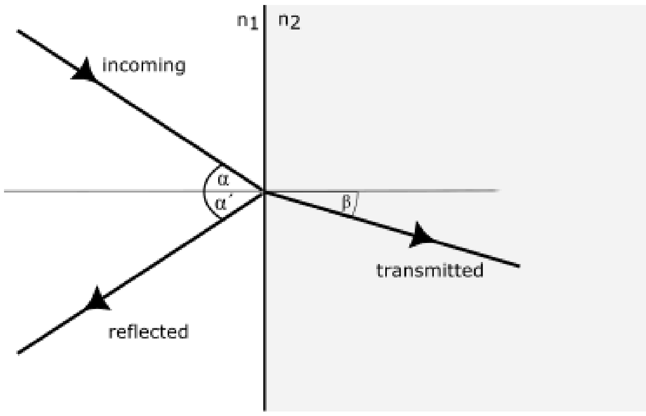

Abbildung 1: Reflexion und Transmission eines Lichtstrahls zwischen zwei Medien verschiedener Brechungsindizes.

Trifft ein Lichtstrahl auf den Übergang eines Mediums mit Brechungsindex n_1 zu einem Medium mit n_2, so kommt es im Allgemeinen zu einer Reflexion, sowie zu einer Transmission (siehe Abbildung 1). Nach dem Snellius'schen Brechungsgesetz gilt zwischen den Winkeln α der einlaufenden und β der transmittierten Welle der Zusammenhang

$$\frac{\sin(\alpha)}{\sin(\beta)} = \frac{n_2}{n_1}. \tag{9}$$

Je nach Verhältnis n_2/n_1 ist der Austrittswinkel der transmittierten Welle größer oder kleiner als der Eintrittswinkel der einlaufenden Welle.

Ist das Licht parallel zur Einfallsebene polarisiert, so gibt es einen besonderen Winkel, bei dem das Licht komplett transmittiert wird, der sogenannte Brewster-Winkel $\alpha_B = \arctan(n_2/n_1)$.

Ist $n_1 > n_2$, so gibt es einen kritischen Winkel, ab dem das Licht komplett reflektiert wird, $\alpha_c = \arcsin(n_2/n_1)$. Diese Eigenschaften sollen im Folgenden mit der Materiewelle verglichen werden.

Betrachten Sie eine (ebene) Materiewellenfunktion der Masse m die sich dreidimensional in einem Potential der Form

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } x > 0 \end{cases}, \tag{10}$$

mit $V_0 \in \mathbb{R}$, bewegt. Die Materiewellenfunktion komme aus dem negativen unendlichen mit einer Energie $E = E_x + E_y + E_z$ und Wellenvektor $\vec{k}$. An der Potentialbarriere kann die Welle sowohl reflektiert als auch transmittiert werden.

(a) Bestimmen Sie die allgemeine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung. Welche Komponenten entsprechen Wellen in Transmissionsrichtung und welche in Reflexionsrichtung?
Tipp: Aufgrund von Symmetrie kann das Problem auch auf zwei Dimensionen vereinfacht betrachtet werden.

Mit Hilfe der allgemeinen Lösung soll nun die Brechung des Lichts für die Materiewelle dargestellt werden. Nehmen Sie dafür an, dass die zur Potentialstufe einlaufende Welle für $x < 0$ mit dem Vorfaktor 1 gewichtet sei. Die reflektierte Welle habe dann den Vorfaktor R, während die transmittierte Welle (für $x > 0$) den Vorfaktor T besitze.
Hinweis: Was muss für die zur Potentialstufe einlaufende Welle für $x > 0$ in dieser Interpretation gelten?

(b) Zeigen Sie mit Hilfe von der Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktion und ihrer Ableitung, dass die Koeffizienten der transmittierten und reflektierten Welle in Abhängigkeit der Komponenten des Wellenvektors die Form

$$R = \frac{k_x - k_x'}{k_x + k_x'},\ T = \frac{2k_x}{k_x + k_x'} \tag{11}$$

besitzen, wobei $k_x' = \sqrt{2m(E_x - V_0)/\hbar^2}$ die x-Komponente des Wellenvektors der transmittierten Welle und $k_x = \sqrt{2mE_x/\hbar^2}$ die x-Komponente des Wellenvektors der einlaufenden Welle sind.

(c) Bestimmen Sie die Gleichung für das Verhältnis der Winkel α, β analog zum Brechungsgesetz (9) für Licht, in Abhängigkeit der Komponenten des Wellenvektors k_i und der Energie E. Vergleichen Sie Ihre bisherigen Ergebnisse qualitativ mit dem Verhalten von (9). Welche Rolle spielt V_0 bei der Materiewelle verglichen mit den n_i bei Lichtwellen? Welche Unterschiede ergeben sich für $V_0 > 0, V_0 < 0$?

(d) Prüfen Sie, ob es für die Materiewelle ebenfalls möglich ist einen Brewster-Winkel zu finden und geben Sie ihn gegebenenfalls an. Prüfen Sie des weiteren ob es einen Winkelbereich gibt, in dem die Materiewelle total reflektiert werden kann. Betrachten Sie ebenfalls die dazugehörigen Wellenfunktionen und interpretieren Sie sie.