Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SoSe 2016) -

Übungsblatt 11 (20 Punkte)

Ausgabe 20.06.16 – Abgabe 28.06.16 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

▷ Aufgabe 1 (Anschlussbedingung im δ-Potential)* (2 Punkte)

Für die stationäre Schrödingergleichung $E\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + b\delta(x-a)\right]\psi(x)$, mit δ "Deltafunktion", leite man die sog *Anschlussbedingung* bei $x = a$ her,

$$\psi'(a_+) - \psi'(a_-) = \frac{2mb}{\hbar^2}\psi(a)\,, \tag{1}$$

worin $\psi'(a_\pm) = \lim_{\varepsilon\to 0_+} \frac{d\psi}{dx}|_{x=a\pm\varepsilon}$.

Hinweis: Integrieren Sie die Stationäre Schrödingergleichung $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}$. Benutzen Sie, dass ψ beschränkt und stetig, auch bei $x = a$.

▷ Aufgabe 2 (Kronig-Penney Modell) (10 Punkte)

Ein Elektron in einem Metall "sieht" ein periodisches Potential. Obgleich seine Bewegung unbegrenzt ist, sind aufgrund der Periodizität des Potentials nur bestimmte Energiebänder erlaubt.

(a) Bestimmen Sie die elektronische Bandstruktur für das sog Kronig-Penney Modell,

$$V(x) = \alpha \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(x - ja) \tag{2}$$

Hinweis: Erinnern Sie sich beizeiten an das Bloch'sche Theorem. Die Blochfunktion berechnen Sie zweckmässigerweise im Intervall $(0, a]$. Da steht dann nur eine Deltafunktion, und zwar am rechten Intervallende. Die verarzten Sie dann einfach über die Anschlussbedingung im δ-Potential.

(b) Machen Sie sich ein Bild der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons für stationre Zustände an der oberen bzw unteren Bandkante im "anziehendem" Potential, $\alpha < 0$.

▷ Aufgabe 3 (Ideales Fermigas bei $T = 0$)* (8 Punkte)

Wir betrachten ein ideales Spin-1/2 Fermigas aus N Teilchen in einem Volumen V, also etwa Leitungselektronen in einem Festkörper. Von der Coulombwechselwirkung der Elektronen untereinander wie auch mit dem Ionengitter sei zunächst abgesehen. Das System befinde sich im Grundzustand bei $T = 0$ Kelvin.

(a) Unter Annahme periodischer Randbedingungen bestätige man die Eigenwerte der Einteilchen Energie

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} \tag{3}$$

wo $\vec{k}$ diskrete Wellenvektoren, für periodische Randbedingungen

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}, \qquad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3 . \tag{4}$$

Wie würden Sie die dazugehörigen Einteilchenorbitale notieren?

Unter der Annahme, dass der Spin energetisch keine Rolle spielt, kann nach dem Pauliprinzip jeder Impulszustand, angefangen beim Impulszustand $\hbar\vec{k} = (0, 0, 0)$ zweifach besetzt werden. Die Imulszustände liegen in einer "Impulskugel" vom Radius $p_{\mathrm{F}} := \hbar k_{\mathrm{F}}$, die sog *Fermikugel*. Der Radius dieser Kugel ergibt sich aus der Zahl der Impulszustände in der Fermikugel, die – wegen Spinentartung mit 2 multipliziert – mit der Gesamtzahl der Teilchen identifiziert wird.

(b) Zeigen Sie: Im Kontinuumlimes

$$N = 2 \sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}| \leq k_{\mathrm{F}}} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_{\mathrm{F}}^3 \tag{5}$$

und also Teilchenzahldichte

$$n \equiv N/V = \frac{k_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2} . \tag{6}$$

(c) Die Grundzustandsenergie erhält man durch Summation der Einteilchenenergien. Bestätigen Sie für den Kontinuumlimes

$$E_0 = 2 \sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}| \leq k_{\mathrm{F}}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = N \frac{3}{5} \varepsilon_{\mathrm{F}} \tag{7}$$

worin ε_{F} die sog *Fermi-Energie*,

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = \frac{\hbar^2 k_{\mathrm{F}}^2}{2m} \tag{8}$$

<u>Bemerkenswert</u> ist hier, dass die mittlere Energie pro Teilchen, E_0/N, von Ordnung der maximalen Einteilchenenergie ε_{F}: Ist die Teilchenzahl in einem drei-dimensionalen System nur groß genug, so dass der Kontinuumlimes gerechtfertigt ist, habe fast alle Teilchen die maximale (kinetische) Energie!

(d) Bestätigen Sie die wichtige Beziehung zwischen Fermi-Energie und Teilchendichte,

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3} . \tag{9}$$

und eine ebenso wichtige Beziehung zwischen der räumlichen Dichte der Energie im Grundzustand – die ja reine kinetische Energie ist – und der Teilchendichte,

$$\text{Dichte der kinetischen Energie} \equiv E_0/V = \kappa n^{5/3} , \qquad \kappa = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3^{5/3}\pi^{4/3}}{5} \tag{10}$$

entsprechend einem Druck

$$P_0 \equiv -\left(\frac{\partial E_0}{\partial V}\right)_N = \frac{2}{3} \frac{E_0}{V} . \tag{11}$$

In der Festkörperhysik ist das ideale Fermigas ein beliebter Ausgangspunkt für die Physik der Elektronen in Metallen oder Halbleitern. Die fundamentale Längenskala ist hier der Bohr'sche Radius, die fundamentale Energieskala das Rydberg. Eine Material-spezifische Längenskala vermittelt das Kugelvolumen, das jedem Leitungselektron zukommt,

$$\frac{V}{N} \equiv \frac{1}{\varrho} =: \frac{4\pi}{3} r_s^3 , \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi\varrho} \right)^{1/3} \tag{12}$$

Typische Werte von r_s/a_0 sind 2 bis 6.

(d) Bestätigen Sie

$$k_F = \frac{3.63}{r_s/a_0} \mathrm{A} , \qquad v_F = \frac{4.20}{r_s/a_0} \times 10^6 \mathrm{m/sec} , \qquad \varepsilon_F = \frac{50.1}{(r_s/a_0)^2} \mathrm{eV} . \tag{13}$$

Mit typischen Geschwindigkeiten entsprechend einem Prozent der Lichtgeschwindigkeit sind Elektronen dank Pauli-Verbot in Metallen zwar ziemlich schnell![1], dürfen aber getrost nicht-relativistisch behandelt werden.

[1] Und üben angesichts $P \sim 10^8$Atm einen ziemlichen Druck aus. Kompensiert wir dieser Fermidruck in Metallen durch die Coulombwechselwirkungen der beteiligten Ladungsträfger – das sind die Ionenrümpfe und die Elektronen – die hier allerdings unberücksichtigt bleiben.