Prof.Dr. H.Lenske
Dr. U.Badarch
Dipl.-Phys. M.Strecker
Institut für Theoretische Physik I

Übungsblatt Nr. 5

Präsenzaufgaben am 16.05.11, Hausaufgaben zum 23.05.11

Minitest 1: (15 min)
Berechnen Sie für $f(x) = e^{(\alpha+i\beta)x}$

M1) $|f(x)|$

M2) $Imf(x)$, $Ref(x)$

M3) $\ln f(x)$

M4) $f^*(x)$, $\frac{1}{f(x)}$

Präsenzaufgabe 7:
Elektronen bewegen sich in Materialen typischerweise in einem periodischen Potential , dessen Struktur durch die Gitterplätze der Ionen bestimmt wird. Wir betrachten die Bewegungen in einer Raumdimension (z.B. entlang einer Gitter-Kette von Kristall-Ionen).

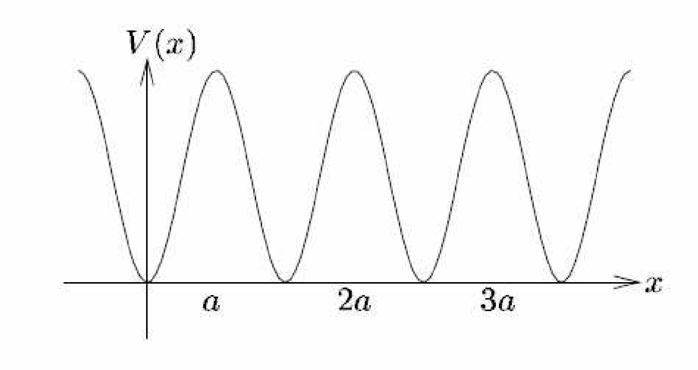


Abb. Periodisches Potential mit Gitterkonstante a.

Es gelte $V(x+a) = V(x)$ mit der "Gitterkonstanten"a. Es sollen stationäre Zustände $\varphi(x)$ in $V(x)$ untersucht werden.

a.) Welche Symmetrie besitzt der zugehörige Hamiltonoperator?

b.) Der (räumliche) Translationsoperator T_a ist definiert durch die Relation $T_a f(x) = f(x+a)$ für beliebige (stetige) Funktionen $f(x)$. Was gilt dann für $T_a H\varphi(x)$? Zeigen Sie, dass $[H, T_a] = 0$ gilt. Was folgt daraus für die Eigenfunktionen von H?

c.) Zeigen Sie, dass $\varphi(x+a) = e^{\frac{i}{\hbar}ap}\varphi(x)$ gilt. Was folgt damit für die explizite Form von T_a?

d.) Die Eigenwerte λ_a von T_a seien als $\lambda_a = e^{ika}$ gegeben. Es gelte $u_k(x) = e^{-ikx}\varphi(x)$. Zeigen Sie, dass $T_a u_k(x) = u_k(x)$ invariant unter der Translation T_a ist.

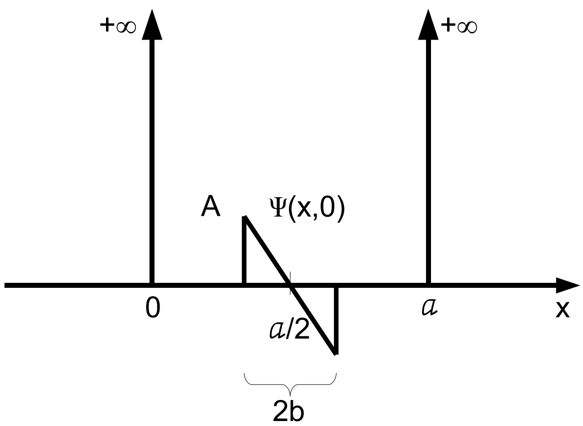
e.) Warum genügt es, die Lösungen in der ersten Brillouin-Zone $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ zu betrachten?

Die Funktionen $\varphi(x) = e^{ikx}u_k(x)$ mit $k \in R$ heißen **Bloch-Wellen**. Es sind ebene Wellen, die durch eine periodische Funktion $u(x)$ mit der Periode des Potentials moduliert werden.

Hausaufgabe 10: (9 Punkte)
Ein quantenmechanisches Teilchen der Masse m bewegt sich in einer räumlichen Dimension in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden bei $x = 0$ und $x = a$. Zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich das Teilchen in folgendem Zustand:

$$\Psi(x,0) = A\Theta(x - (\frac{a}{2} - b))\Theta(\frac{a}{2} + b - x)(\frac{a}{2} - x)\frac{1}{b}$$

wobei A eine Normierungskonstante ist und $b < \frac{a}{2}$ gilt (siehe Zeichnung).



a.) Berechnen Sie die Normierungskonstante A.

b.) Geben Sie die normierten Eigenfunktionen $\varphi_n(x)$ und Energie-Eigenwerte E_n des unendlichen tiefen Potentialtopfs an. Welche Symmetrie liegt vor?

c.) Entwickeln Sie $\Psi(x,0)$ nach dem vollständigen System $\{\varphi_n\}_{n=1..\infty}$, d.h.

$$\begin{aligned} \Psi(x,0) &= \sum_{1\leq n\leq\infty} c_n\varphi_n(x) \\ c_n &= \int_0^{+a} dx\varphi_n(x)\Psi(x,0) \end{aligned}$$

Wie verhalten sich die Koeffizienten als Funktion der Quantenzahl n? Warum verschwinden die Koeffizienten $c_{2k+1} \equiv 0$? Skizzieren und diskutieren Sie das Verhalten von c_n für $n \to \infty$.

d.) Geben Sie $\Psi(x,t)$ für belebige Zeiten $t \neq 0$ an.

Hausaufgabe 11: (6 Punkte)
Gegeben sei ein Potential $V(x)$ der Form:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ -V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

a.) Geben Sie die Schrödinger-Gleichung und die allgemeinen vollständigen Lösung der resultieren Differentialgleichung für $E > 0$ und $E < 0$.

b.) Wie lauten die Randbedingunen für gebundene stationäre Zustand $\phi(x)$ bei $x = 0$, $x = a$ und $x \to +\infty$?

c.) Leiten Sie die Eigenwertgleichung für gebundene Zustände her.

d.) Zeigen Sie, dass die Eigenwerte sich als Schnittpunkte zweier Funktionen ergeben. Skizzieren Sie die beiden Funktionen.

Zusatzaufgabe 3: (3 Punkte)
Berechnen Sie das Integral

$$\Theta(x) = \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikx}}{k - i\varepsilon} dk$$

mit Hilfe des Residuensatzes.

Blatt 5 Theo 4 Julian Bergmann 18/15

H 10

a) $1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = \frac{A^2}{b^2} \int_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} (\frac{a}{2}-x)^2 dx = \frac{A^2}{b^2} \int_{b}^{-b} z^2 \cdot \frac{1}{-1} dz$

$= \frac{A^2}{b^2} \cdot \frac{1}{3}(b^3+b^3) = A^2 \cdot \frac{2}{3} b \quad \Rightarrow A = \sqrt{\frac{3}{2b}}$ ✓ 2/2

b) $\varphi(x) = A' \sin(kx) + B' \cos(kx)$, $\varphi(0) = 0$, $\varphi(a) = 0$

$\Rightarrow A' \sin(k \cdot 0) + B' \cos(k \cdot 0) = 0 \quad \Rightarrow B' = 0$

$A' \sin(k \cdot a) + B' \cos(k \cdot a) = 0 \quad \Rightarrow A' \sin(k \cdot a) = 0 \quad \Rightarrow \sin(k \cdot a) = 0$

$\Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}, \; n \in \mathbb{N}$

$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |A' \sin(\frac{n\pi}{a} x)|^2 dx = A'^2 \int_0^a \sin^2(\frac{n\pi}{a} x) dx = A'^2 \left[\frac{1}{2} x - \frac{1}{4 \frac{n\pi}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a} \cdot 2x) \right]_0^a$

$= A'^2 \cdot \frac{a}{2} \quad \Rightarrow A' = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \Rightarrow \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a} \cdot x)$ ✓

$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{a^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2$ ✓

$\varphi_n(\frac{a}{2} - x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a} \cdot (\frac{a}{2} - x)) = -\sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}(x - \frac{a}{2}))$

$= -\sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}(x + \frac{a}{2})) = -\varphi_n(\frac{a}{2} + x) \quad \Rightarrow P = -1$ ✓

(bezüglich $\frac{a}{2} = x$ als Symmetriepkt!) 2

c) $c_n = \int_0^a dx \, \varphi_n(x) \Psi(x,0) = \int_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a} x) \cdot \sqrt{\frac{3}{2b}} (\frac{a}{2} - x) \cdot \frac{1}{b} dx$

$= \frac{1}{b} \sqrt{\frac{6}{2ab}} \int_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} \sin(\frac{n\pi}{a} x)(\frac{a}{2} - x) dx$

$= \frac{1}{b} \sqrt{\frac{3}{ab}} \int_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} \sin(\frac{n\pi}{a} x) \frac{a}{2} - \sin(\frac{n\pi}{a} x) \cdot x \, dx$

$= \frac{1}{b} \sqrt{\frac{3}{ab}} \left(\left[-\frac{a}{2} \cos(\frac{n\pi}{a} x) \cdot \frac{a}{n\pi} \right]_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} - \left[\frac{a^2}{n^2\pi^2} \sin(\frac{n\pi}{a} x) - \frac{x \cos(\frac{n\pi}{a} x)}{\frac{n\pi}{a}} \right]_{\frac{a}{2}-b}^{\frac{a}{2}+b} \right)$

$= \frac{1}{b} \sqrt{\frac{3}{ab}} \Big(\frac{a^2}{2n\pi} \big(\cos(\frac{n\pi}{a} \cdot (\frac{a}{2} - b)) - \cos(\frac{n\pi}{a}(\frac{a}{2} + b)) \big)$

$- \Big(\frac{a^2}{n^2\pi^2} \big(\sin(\frac{n\pi}{a}(\frac{a}{2} + b)) - \sin(\frac{n\pi}{a}(\frac{a}{2} - b)) \big) - \frac{a}{n\pi} \big((\frac{a}{2} + b) \cos(\frac{n\pi}{a}(\frac{a}{2} + b))$

$- (\frac{a}{2} - b) \cos(\frac{n\pi}{a}(\frac{a}{2} - b)) \big) \Big) \Big)$

$= \frac{1}{b} \sqrt{\frac{3}{ab}} \Big(\frac{a^2}{2n\pi} \cdot 2 \sin(\frac{n\pi}{2}) \sin(\frac{bn\pi}{a}) - \Big(\frac{a^2}{n^2\pi^2} \cdot 2 \cos(\frac{n\pi}{2}) \sin(\frac{bn\pi}{a})$

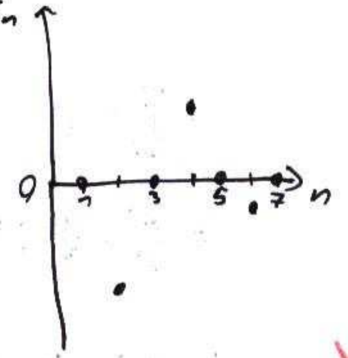
$- \frac{a}{n\pi} \big(2b \cos(\frac{bn\pi}{a}) \cos(\frac{n\pi}{2}) - a \sin(\frac{n\pi}{2}) \sin(\frac{bn\pi}{a}) \big) \Big) \Big)$

$= \frac{1}{b} \sqrt{\frac{3}{ab}} \Big(\frac{2a}{n^2\pi^2} \big(\cos(\frac{n\pi}{2}) \big(bn\pi \cos(\frac{bn\pi}{a}) + a \sin(\frac{bn\pi}{a}) \big) \big) \Big)$

$= \frac{2a}{bn^2\pi^2} \sqrt{\frac{3}{ab}} \underbrace{\cos(\frac{n\pi}{2})}_{0 \text{ für } n = 2k+1, \, k \in \mathbb{N}} \left(bn\pi \cos(\frac{bn\pi}{a}) + a \sin(\frac{bn\pi}{a}) \right)$ ✓

mit Summanden $\sim \frac{1}{n^2}$ bzw $\sim \frac{1}{n}$ folgt

$c_n \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$.



✓ 4/4

~~H 11~~

d) $\Psi(x,t) = \Psi(x,0)\cdot e^{i\omega t} = \sqrt{\frac{3}{2b}}\,\Theta(x-(\frac{a}{2}-b))\,\Theta(\frac{a}{2}+b-x)\,(\frac{a}{2}-x)\frac{1}{b}e^{i\omega t}$ ✓ 1/1

H 11

a) $H\varphi = E\varphi \Rightarrow \cancel{\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(x)+V(x)=E\cdot\varphi(x)}\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\cdot\varphi(x)$

$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\varphi(x) = 0$

$\Rightarrow \varphi_0(x \leq 0) = 0$

$\varphi(0 \leq x \leq a):\ \varphi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\varphi_1(x) = 0$ ✓

$E>0:\ \varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$ m. $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar}(E+V_0)$

$-V_0<E<0:\ \varphi_1(x) = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x}$ m. $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar}(V_0+E)$ ✓

~~$E<-V_0<0:\ \varphi_1(x) = A_3 e^{\varkappa_1x} + B_3 e^{-\varkappa_1x}$ m. $\varkappa_1^2 = \frac{2m}{\hbar}(-V_0-E)$~~

$\varphi(x>a):\ \varphi_2''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi_2(x) = 0$ ✓

$E>0:\ \varphi_2(x) = C_1 e^{ik_3x} + D_1 e^{-ik_3x}$ m. $k_3^2 = \frac{2m}{\hbar}E$

$-V_0<E<0:\ \varphi_2(x) = C_2 e^{\varkappa_2x} + D_2 e^{-\varkappa_2x}$ m. $\varkappa_2^2 = \frac{2m}{\hbar}(-E)$ ✓

~~$E<-V_0<0:\ \varphi_2(x) = C_3 e^{\varkappa_2x} + D_3 e^{-\varkappa_2x}$~~

2/2

b) gebunden stationär $\Leftrightarrow -V_0 \leq E \leq 0$

$\varphi_1(0) = 0$, $\cancel{\varphi_2(a)=0}$ $\varphi_1(a) = \varphi_2(a)$ $\quad \varphi_2(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} 0$ ✓ 1/1

$\varphi_1'(a) = \varphi_2'(a)$

c) $\varphi_1(0) = 0 = A_2 + B_2$ ~~$\Rightarrow \varphi(a) = e^{ik_2a} + r e^{-ik_2a}$ m. $r = \frac{B_2}{A_2}$~~

$\varphi_1(a) = A_2 e^{ik_2a} + B_2 e^{-ik_2a} \overset{!}{=} C_2 e^{\varkappa_2a} + D_2 e^{-\varkappa_2a} = \varphi_2(a)$

$\varphi_1'(a) = ik_2(A_2 e^{ik_2a} - B_2 e^{-ik_2a}) \overset{!}{=} \varkappa_2(C_2 e^{\varkappa_2a} - D_2 e^{-\varkappa_2a}) = \varphi_2'(a)$

$\varphi_2(x) = C_2 e^{\varkappa_2x} + D_2 e^{-\varkappa_2x} \xrightarrow[x\to\infty]{!} 0 \Rightarrow C_2 \overset{!}{=} 0$ ✓

~~$\Rightarrow 2 e^{ik_2a} = (1-\frac{\varkappa}{ik})D_2 e^{-\varkappa_2a}$~~

~~$2 e^{-ik_2a} = (1+\frac{\varkappa}{ik})D_2 e^{-\varkappa_2a}$~~

$\Rightarrow A_2 e^{ik_2a} + B_2 e^{-ik_2a} = D_2 e^{-\varkappa_2a}$

$A_2 e^{ik_2a} - B_2 e^{-ik_2a} = -\frac{\varkappa}{ik}D_2 e^{-\varkappa_2a} = -\frac{\varkappa}{ik}(A_2 e^{ik_2a} + B_2 e^{-ik_2a})$

$\Rightarrow A_2(1+\frac{\varkappa}{ik})e^{ik_2a} + B_2(\frac{\varkappa}{ik}-1)e^{-ik_2a} = 0$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ (1+\frac{\varkappa}{ik})e^{ika} & (\frac{\varkappa}{ik}-1)e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

d) $\ldots = M \cdot \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \det(M) \overset{!}{=} 0$

$$\det(M) = (\tfrac{\varkappa}{ik}-1)e^{-ika} - (\tfrac{\varkappa}{ik}+1)e^{ika}$$

$$= \frac{\varkappa}{ik}(e^{-ika} - e^{ika}) + (-e^{ika} - e^{-ika})$$

$$= \frac{\varkappa}{ik}\big(\underbrace{\cos(-ka)}_{\cos(ka)} + \underbrace{i\sin(-ka)}_{-i\sin(ka)} - \cos(ka) - i\sin(ka)\big) \cancel{+ 2i\sin(ka)}$$

$$\cancel{= 2i\sin(ka)(1 - \tfrac{\varkappa}{ik})} + \big(-\cos(ka) - i\sin(ka) - \cos(-ka) \underbrace{- i\sin(-ka)}_{+i\sin(ka)}\big)$$

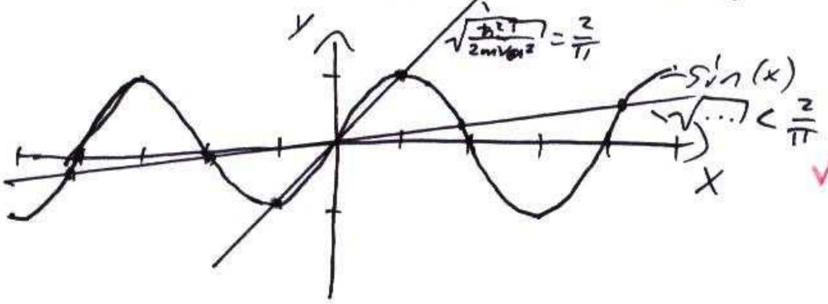
$$= \frac{\varkappa}{ik}(-2i)\sin(ka) + (-2)\cos(ka) \overset{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \frac{\sin(ka)}{\cos(ka)} + \frac{k}{\varkappa} = 0 = \tan(ka) + \frac{k}{\varkappa}$$ ✓ 2|2

$$\Rightarrow ka \in [\tfrac{\pi}{2}+n\pi, \pi+n\pi] \Rightarrow \tan < 0$$

$$\Rightarrow \cot^2(ka) = \frac{\varkappa^2}{k} = -\frac{E}{E+V_0} = \frac{1}{\sin^2(ka)} - 1$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sin^2(ka)} = \frac{V_0}{E+V_0} \Rightarrow \sin(ka) = \sqrt{\frac{E+V_0}{V_0}} = \sqrt{\frac{k^2\hbar^2}{2mV_0}} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}}\,ka$$



✓ 1|1

Z 3

$R = \frac{p}{q} = \frac{e^{ikz}}{k - i\varepsilon}$, grad(q) ≥ grad(p)+1 & R hat höchsten einfache Pole.

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \ldots = 2\pi i \sum_{\substack{q(c)=0 \\ \mathrm{Im}(c)>0}} \mathrm{Res}_R(c) \cdot R(z)e^{it} + \pi i \sum_{j=1}^{k} \mathrm{Res}_R(c_j) R(z) e^{iz}$$

$$\Rightarrow \Theta = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{1}{2\pi i} \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik}}{k - i\varepsilon x} & x \geq 0 \\ \int_{\infty}^{-\infty} \frac{e^{ik}}{k - i\varepsilon x} & x < 0 \end{cases} \quad (k = kx)$$

$$= \lim_{\varepsilon \to 0^+} \begin{cases} \mathrm{Res}_{\frac{e^{ik}}{k - i\varepsilon x}}(i\varepsilon x) & x \geq 0 \\ \cancel{\mathrm{Res}_{\frac{e^{ik}}{k-i\varepsilon x}}(i\varepsilon x) = 0}\ 0, \text{ da } \mathrm{Im}(i\varepsilon x) < 0 & x < 0 \end{cases}$$

$$= \lim_{\varepsilon \to 0^+} \begin{cases} e^{-\varkappa x \varepsilon} & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$ ✓ 3|3