Theoretische Physik V
Fortgeschrittene QM
SS 2017

4. Übung

Theoretische Physik (NT)
Universität des Saarlandes
Prof. Dr. Heiko Rieger

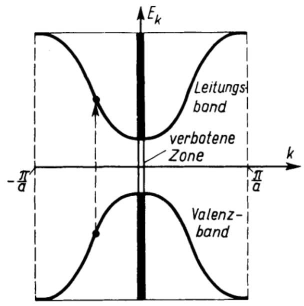
Bitte werfen Sie Ihre Lösung bis zum 17.05.2017 um 12 Uhr in das Postfach von Prof. Dr. Heiko Rieger im Erdgeschoss von Gebäude E2 6 ein. Die Abgabe sollte in Zweiergruppen erfolgen.

1. [*15 Punkte*] **Teilchen im periodischen Potential - Teil 2**
In Aufgabe 2 der 3. Übung wurde ein Teilchen in einem periodischen Gitterpotential betrachtet und mit Hilfe des Bloch-Theorems ein Lösungsansatz für die Wellenfunktion des Teilchens hergeleitet. An dieser Stelle führen wir nun die Betrachtung dieses Systems fort.

$\boxed{5}$ (a) Leiten Sie ausgehend von der Schrödingergleichung folgende Differentialgleichung für $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ her:

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 - 2\imath\mathbf{k}\cdot\nabla - \Delta\right) + V(\mathbf{x})\right\} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad .$$

Für ein gegebenes $\mathbf{k}$ existieren unterschiedliche Energieeigenwerte, die die Differentialgleichung erfüllen. Die Energien hängen somit nicht nur von der kontinuierlichen Wellenzahl $\mathbf{k}$ ab, sondern auch von einem weiteren diskreten Wert j. Hierdurch ergibt sich eine energetische Bandstruktur, wobei j die einzelnen Bänder durchnummeriert. Diese Energiebänder werden dem Pauli-Prinzip entsprechend mit ansteigender Energie mit Elektronen aufgefüllt. Das oberste voll besetzte Band wird als Valenzband bezeichnet, das erste leere oder nur teilweise gefüllte Band als Leitungsband. Dies ist in nebenstehender Abbildung veranschaulicht.



$\boxed{10}$ (b) In der Nähe einer Bandkante kann man die Energie nach k entwickeln. Unter der Bandkante versteht man den höchsten bzw. niedrigsten Energiewert (Bandober- bzw. Bandunterkante), den ein Elektron innerhalb eines Bandes annehmen kann. Für kleine k-Werte erhält man

$$E_{\mathbf{k},j} = E_{0,j} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad .$$

Hierbei ist m^* die effektive oder scheinbare Masse eines Elektrons. Ihre Bedeutung soll im Folgenden untersucht werden. Dazu beweisen wir folgenden **Satz**:
Elektronen im periodischen Kristallfeld, die sich am unteren Ende des Leitungsbandes befinden, verhalten sich unter dem Einfluss zusätzlicher, langsam veränderlicher Felder wie Elektronen im freien Raum, aber mit einer scheinbaren Masse m^*.
Zum Beweis des Satzes sind folgende Definitionen erforderlich:

- $W(\mathbf{x})$: Potential der Zusatzfelder, das sich nur langsam über den Kristall hinweg ändert und innerhalb einer Gitterzelle als konstant betrachtet werden kann
- $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$: Lösungen der Schrödingergleichung für $V(\mathbf{x})$ ohne $W(\mathbf{x})$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right\}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$$

$$\text{mit} \quad \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\, e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad \text{(Bloch-Theorem)}$$

Dabei ist N die Anahl der Gitterzellen des Kristalls und $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ ist auf eine Gitterzelle normiert.

Hiermit kann der zu beweisende Satz mathematisch formuliert werden:
Die Energieeigenwerte und Wellenfunktionen des vollständigen Problems

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) + W(\mathbf{x})\right\}\varphi(\mathbf{x}) = E\varphi(\mathbf{x}) \qquad (*)$$

Benjamin Bogner, E2 6, Zi.4.27 — bbogner@lusi.uni-sb.de
Anne Hafner, E2 6, Zi.4.23 — anne.hafner@lusi.uni-sb.de

können durch die Energieeigenwerte und Wellenfunktionen des Problems

$$\left\{E_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta + W(\mathbf{x})\right\}\psi(\mathbf{x}) = E'\psi(\mathbf{x}) \qquad (**)$$

bestimmt werden. Dabei werden folgende Annahmen getroffen:

- Die Energieeigenwerte E und E' stimmen überein.
- In der Entwicklung von $\varphi(\mathbf{x})$ nach Blochwellen und der Entwicklung von $\psi(\mathbf{x})$ nach ebenen Wellen stimmen die Entwicklungskoeffizienten $c_{\mathbf{k}}$ überein:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad ,$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{\imath\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad .$$

i. Setzen Sie die Entwicklung von $\varphi(\mathbf{x})$ in $(*)$ ein, um eine Gleichung für die Koeffizienten $c_{\mathbf{k}}$ zu erhalten.
ii. Nutzen Sie die Voraussetzungen über $W(\mathbf{x})$ und $E_{\mathbf{k}}$, um die Gleichung zu vereinfachen.
iii. Zeigen Sie unter Verwendung der Entwicklung von $\psi(\mathbf{x})$ nach ebenen Wellen, dass die gewonnene Gleichung für die Koeffizienten $c_{\mathbf{k}}$ äquivalent zu $(**)$ ist.

2. [*15 Punkte*] **Hartree-Fock Gleichungen für ein Elektronengas**

Wenden Sie die atomaren Hartree-Fock Gleichungen auf ein Elektronengas an, das sich innerhalb eines Atomgitters befindet.

5 (a) Zeigen Sie, dass die Hartree-Fock Gleichungen durch ebene Wellen gelöst werden.

10 (b) Ersetzen Sie die Kerne durch einen positiven homogenen Hintergrund gleicher Gesamtladung und zeigen Sie, dass sich der Hartree-Term gegen die Coulomb-Anziehung durch den positiven Hintergrund kompensiert.
Die elektronischen Energie-Niveaus ergeben sich dann zu

$$\epsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{(\hbar\boldsymbol{k})^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{q}} \frac{4\pi e^2}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}|^2}\Theta(k_F - q).$$

3. [*10 Punkte*] **Dynamische Suszeptibilität und Leistungsaufnahme eines gedämpften harmonischen Oszillators**

5 (a) Die Bewegungsgleichung eines klassischen, gedämpften harmonischen Oszillators lautet allgemein

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \gamma\frac{d}{dt} + \omega_0^2\right)x(t) = K(t)/m$$

mit der Masse m, der Frequenz ω_0, der Dämpfungskonstanten γ und einer externen Antriebskraft $K(t)$. Bestimmen Sie die Funktionen $\chi(\omega)$, $\chi'(\omega)$, $\chi''(\omega)$ und $G^{>}(\omega)$.
Anleitung: Lösen Sie dazu die Bewegungsgleichung im Fourierraum und bestimmen Sie die dynamische Suszeptibilität aus

$$\chi(\omega) = \frac{dx(\omega)}{dK(\omega)}.$$

5 (b) Nun betrachten wir den Spezialfall eines periodisch angetrieben Oszillators mit der Antriebskraft $K(t)/m = \frac{k}{m}cos(\omega t)$.
i. Zeigen Sie, dass die Amplitude der Schwingung proportional zum Betrag der linearen Responsefunktion $|\chi|$ des Oszillators ist. Lösen Sie dazu die Bewegungsgleichung im komplexen Fall für $z = x + \imath \cdot y$ mit $K(t) = \frac{k}{m}e^{\imath\omega t}$ und leiten Sie daraus die statische Lösung $x(t) = A\cos(\omega t + \phi)$ ab.
ii. Die Leistungsaufnahme eines Oszillators ist definiert als $P(t) = K(t)\cdot\dot{x}(t)$. Zeigen Sie, dass die mittlere Leistungsaufnahme $\bar{P} = \langle P(t)\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T dt\ P(t)$ des Oszillators proportional zur Intensität der Anregung k^2 und dem Imaginärteil der linearen Responsefunktion ist.

Benjamin Bogner, E2 6, Zi.4.27 — bbogner@lusi.uni-sb.de
Anne Hafner, E2 6, Zi.4.23 — anne.hafner@lusi.uni-sb.de