INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Technische Universität Braunschweig

Prof. Dr. W. Brenig
M.Sc. Boris Celan

Quantentheorie WS 2014/15

4. Übungsblatt Abgabe: Di, 18.11.2014 bis 11.30 Uhr, Kasten neben A316

Übungsblätter gibt es unter `https://www.tu-bs.de/theophys/edu/wise-1415/quanten`.

10. **δ-Potential und Kronig-Penny Modell (15 Punkte)**
Wir betrachten die eindimensionale stationäre Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\Phi(x) = E\Phi(x),$$

wobei $V(x)$ ein attraktives δ-Potential ist

$$V(x) = -V_0\delta(x), \qquad V_0 > 0.$$

In diesem Fall ist die Wellenfunktion $\Phi(x)$ zwar stetig bei $x = 0$, die Ableitung $\Phi'(x)$ springt dort aber aufgrund des δ-förmigen Potentials.

(a) Berechnen Sie die Höhe des Sprunges in der Ableitung der Wellenfunktion

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left(\Phi'(\epsilon) - \Phi'(-\epsilon)\right).$$

Integrieren Sie dazu die stationäre Schrödingergleichung in einem kleinen Bereich um $x = 0$.

(b) Betrachten Sie den Fall der gebunden Zustände mit $E < 0$. Bestimmen Sie dafür alle Lösungen $\Phi(x)$ der stationären Schrödingergleichung und normieren Sie diese.
Hinweis: Wählen Sie dazu einen geeigneten Ansatz für den Bereich $x < 0$ sowie einen weiteren für den Bereich $x > 0$. Vergleichen Sie diesen Ansatz mit dem Ansatz aus Aufgabe (8) zum 1D Potentialtopf.

Wir wollen nun mithilfe des δ-Potentials ein einfaches Modell des Festkörpers betrachten, das Kronig-Penny Modell. Gegeben sei dabei folgendes Potential

$$V(x) = V_0\sum_{n\in\mathbb{Z}}\delta(x - n\,a), \qquad V_0 > 0.$$

Dieses Potential soll eine Beschreibung von eindimensional periodisch angeordneten Atomen im Abstand a sein. Wir interessieren uns für das Verhalten eines freien Teilchens (z.b. Valenzelektron) in diesem Potential.

(c) Lösen Sie die Schrödingergleichung in dem Bereich

$$B_n = \{n \mid na < x < (n+1)a\}.$$

(d) Bestimmen Sie die Anschlussbedingung für die Lösungen bei $x = na, n \in \mathbb{Z}$.

Bitte wenden! $\rightarrow$

(e) Aufgrund der Periodizität des Potentials $V(x+a) = V(x)$ kann die Lösung als Bloch-Welle angesetzt werden, d.h.

$$\Phi(x) = e^{iKx} u_K(x)$$

mit periodischem u_K: $u_K(x+a) = u_K(x)$. Setzen Sie diesen Ansatz in Ihre Anschlussbedingungen ein und leiten Sie daraus eine Eigenwertgleichung für die Energie E her.

(f) Geben Sie eine allgemeine Formel für die oberen Kanten der Energiebänder an. Skizzieren Sie die untersten 3 Energieniveaus als Funktion von K/a für $amV_0/\hbar^2 = 2$.

11. **Streuung und Reflexion an Potentialbarrieren (5 Punkte)**
In der Vorlesung wurde der Tunneleffekt an einer Potentialbarriere behandelt und Ergebnisse für Reflexions- und Transmissionskoeffizienten angegeben. Wir wollen diese Ergebnisse nachrechnen.

(a) Betrachteten Sie dazu folgendes Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ U & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases} \qquad U > 0,$$

wobei wir Energien $E < U$ betrachten wollen. Der allgemeine Ansatz einer Lösung der stationären Schrödingergleichung für diesen Fall ist

$$\Phi(x) = \begin{cases} a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx} & \text{für } x < 0, \\ b_1 e^{qx} + b_2 e^{-qx} & \text{für } 0 < x < a, \\ c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} & \text{für } x > a. \end{cases}$$

Wir lassen nun von links eine ebene Welle einfallen (d.h. $a_1 = 1$ und $c_2 = 0$), welche auf die Potentialbarriere trifft. Zeigen Sie unter Benutzung von Transfermatrizen für die Anschlussbedingungen von Φ und Φ', dass für die Koeffizienten a_2 und c_1 gilt

$$a_2 \equiv R(E) = -\frac{i}{2} \frac{(k/q + q/k)\sinh(qa)}{\cosh(qa) + (i/2)(q/k - k/q)\sinh(qa)},$$

$$c_1 \equiv S(E) = \frac{e^{-ika}}{\cosh(qa) + (i/2)(q/k - k/q)\sinh(qa)}.$$

(b) Wir betrachten statt einer Potentialbarriere nun einen Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ -U & \text{für } 0 < x < a \\ 0 & \text{für } x > a \end{cases} \qquad U > 0.$$

Überlegen Sie sich analog zu Aufgabenteil (a) einen allgemeinen Ansatz für die Wellenfunktion $\Phi(x)$. Zeigen Sie anschließend, dass für den Transmissionskoeffizienten einer von links einfallende Welle gilt

$$S(E) = \frac{e^{-ika}}{\cos(qa) - (i/2)(q/k + k/q)\sin(qa)},$$

mit $k = \sqrt{2mE}$ und $q = \sqrt{2m/\hbar^2(E+U)}$.