Übung zur Quantenmechanik I
Sommersemester 2008

zum Üben

31. Bändermstruktur

Man betrachte ein quasifreies Elektron der Masse m in einem effektivem Potential V_{eff} eines unendlich ausgedehnten Festkörpers. Zwei der drei Raumdimensionen sollen zur einfacheren Berechnung unterdrückt und das Potential durch eine periodische Deltafunktion, die den Effekt des Kernes inklusive der Rumpfelektronen simulieren soll, beschrieben werden:

$$V_{\text{eff}} = -\frac{\hbar^2 \lambda}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na) \ ,$$

wobei a die Gitterkonstante ist.

a) Sei $T(a)$ der Translationsoperator, $T(a)\psi(x) := \psi(x - a)$. $T(a)$ erzeugt also eine Translation um einen Gitterabstand a. Zeigen Sie, dass $T(a)$ unitär ist. Zeigen Sie **damit**, dass jeder Eigenvektor von $T(a)$ eine Gleichung der Form

$$\psi_\phi(x + na) = e^{-in\phi}\psi_\phi(x) \qquad n \in \mathbb{Z}$$

erfüllt, wobei ϕ eine Zahl zwischen 0 und 2π ist, die den Eigenzustand $\psi_\phi(x)$ charakterisiert. Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator $H = p^2/2m + V_{\text{eff}}(x)$ mit $T(a)$ kommutiert.

b) Zeigen Sie, dass sich $T(a)$ mit Hilfe des Impulsoperators gemäß $T(a) = e^{-iaP/\hbar}$ darstekken lässt. Geben Sie nun den allgemeinsten, durch ϕ charakterisierten Eigenzustand von $T(a)$ als Linearkombination von Impuls-Eigenzuständen an.
(Hinweis: Eine Taylorentwicklung kann immer helfen.)

c) Bezeichnet $\mathcal{B}_l$ eine Brillouinzone $la < x < (l+1)a$, so lässt dich jeder Eigenzustand von H dort als Überlagerung einer nach links und einer nach rechts laufenden ebenen Welle darstellen (man betrachte das Eigenwertproblem fuer positive Energien E), wobei die entsprechenden Amplituden mit A_l und B_l bezeichnet seien. Drücken Sie unter Verwendung des Resultats aus a) diese Amplituden durch A_0, B_0 und ϕ aus. Zeigen Sie nun, dass die Bedingung für die Existenz einer nichttrivialen Lösung in der Form

$$\cos\phi = f(E)$$

geschrieben werden kann und zeigen Sie, dass diese Bedingung nicht für alle E eine Lösung hat (betrachten Sie dazu die Funktion f in einer Umgebung der Werte $E_n = (\hbar\pi n)^2/2ma^2$ mit $n \in \mathbb{Z}$).

d) Betrachten Sie die obige Energiebedingung im Grenzfall $\lambda \to \pm\infty$ und vergleichen Sie diese mit den Energieeigenwerten für ein Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf (Aufgabe 19). Begründen Sie das Ergebnis qualitativ.