
9. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2013/2014

TUTORIUM: Freitag, 10.01.2014

19. Dreidimensionaler Harmonischer Oszillator 2+1.5+1.5=5 Punkte

Betrachten Sie den dreidimensionalen harmonischen Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{r}}^2. \quad (1)$$

- a) Berechnen Sie die Energieeigenwerte E_n und die Energieeigenzustände $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ mittels Separation in Polarkoordinaten r, θ, ϕ . (Hinweis: Machen Sie –ähnlich wie für das Coulombpotential– einen Potenzreihenansatz für die radiale Wellenfunktion und ermitteln Sie die entsprechende Abbruchbedingung. Überlegen Sie hierbei zuerst wie die entsprechenden Randbedingungen bei $r = 0$ und $r = \infty$ (asymptotisches Verhalten) für die Wellenfunktion aussehen.)
- b) Betrachten Sie den Unterraum des ersten angeregten Zustands. Geben Sie die Wellenfunktionen $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ an, die eine Basis für diesen Unterraum bilden. Bestimmen Sie die Linearkombinationen dieser Basisfunktionen, die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators in kartesischen Koordinaten sind.
- c) Führen Sie dieselben Berechnungen wie in Punkt b) durch, aber für den Unterraum des zweiten angeregten Zustands.

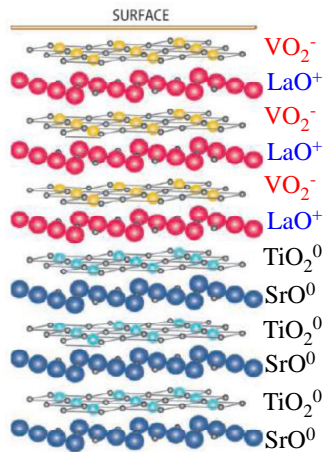
20. Beschränkung der dreidimensionalen Bewegung in Heterostrukturen 2+1.5+1.5=5 Punkte

In den letzten Jahren hat es einen enormen experimentellen Fortschritt bei der Herstellung von sogenannten Oxid-Heterostrukturen gegeben. Diese könnten eines Tages konventionelle Halbleiter zumindest für spezifische Anwendungen ersetzen. Ein Elektron in einem Halbleiter kann näherungsweise als freies Teilchen aber mit einer anderen (effektiven) Masse m^* betrachtet werden. In n-dotiertem GaAs hat man zum Beispiel $m^* = 0.067m_e$, wobei m_e die Masse eines freien Elektrons im Vakuum ist. Der Hamilton-Operator für dieses Elektron ist daher durch $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m^*}$ gegeben.

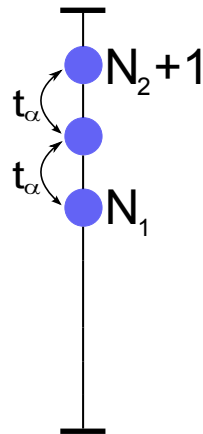
- a) Berechnen Sie die Energieeigenwerte und Eigenfunktionen für ein Elektron, das sich in einer in z -Richtung 10 nm dicken aber in x - und y -Richtung unendlich ausgedehnten GaAs-Schicht befindet, d.h. Sie können $V = 0$ innerhalb der Schicht und $V = \infty$ außerhalb der Schicht annehmen.

Für Elektronen in Übergangsmetalloxid-Heterostrukturen wie z.B. LaVO_3 auf einem isolierenden SrTiO_3 -Substrat (siehe Abbildung 1a) ist eine Beschreibung als freies Teilchen mit effektiver Masse nicht mehr passend. Stattdessen ist ein sogenanntes “tight-binding”-Modell für das Hüpfen von Gitterplatz zu Gitterplatz besser geeignet. In der letzten Übung (Beispiel 18) wurde gezeigt, dass für die relevanten t_{2g} -Orbitale das Hüpfen nur innerhalb einer Orbitalart erfolgt.

a)



b)



c)

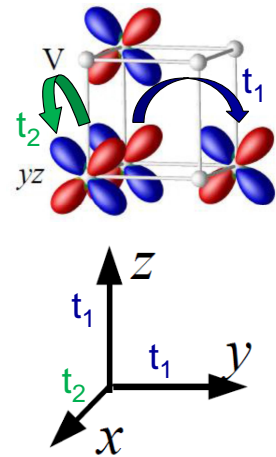


Abbildung 1: a) LaVO_3 Heterostruktur. b) Beschränkung des Hüpfens auf die z -Richtung. c) Veranschaulichung des Hüpfens: hier yz -Orbital.

Wenn wir *nur* das Hüpfen in z -Richtung betrachten und $\psi_{n(l=2)\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ auf dem Gitterplatz \mathbf{R}_i mit $|i\alpha\rangle$ identifizieren, erhalten wir als Hamilton-Operator (siehe Abb. 1c):

$$\hat{H} = \sum_{i=N_1 \dots N_2} t_\alpha (|i, \alpha\rangle \langle i+1, \alpha| + |i+1, \alpha\rangle \langle i, \alpha|).$$

- b) Berechnen Sie nun die Energieeigenwerte für $N_1 = 1, N_2 = 2$, d.h. 3 Gitterplätze mit $t_{xz} = t_{yz} = t_1 > t_2 = t_{xy}$, siehe Fig. 1b. Stellen Sie zu diesem Zweck den Hamiltonoperator als Matrix bezüglich der entsprechenden Basisfunktionen dar.
- c) Berechnen Sie die Energieeigenwerte einer unendlichen eindimensionalen Kette (d.h. $N_1 \rightarrow -\infty, N_2 \rightarrow \infty$). (*Hinweis: Versuchen Sie einen Fourieransatz. Eine vollständige Lösung inklusive der Bewegung in x - und y -Richtung finden Sie in arxiv.org/abs/1308.2615/ bzw. *Phys. Rev. B* 88, 125401 (2013).*)

Frohe Weihnachten und ein gutes neues Jahr!