
3. Übung zur Quantenmechanik II

Sommersemester 2009

ABGABE: Freitag, 27.03.2009, zu Beginn der Übungstunde (Tutorium)

7. Kristallfeld Aufspaltung

2+2+1+1=6 Punkte

Der Hamilton-Operator H_0 eines einzelnen Atoms ist rotationsinvariant (Kugelsymmetrie). Die Atome eines kristallinen Festkörpers sind allerdings in einem Gitter angeordnet, so dass die Symmetrie des Problems reduziert wird. Das Gitter in einem Festkörper hat z.B. häufig eine kubische Symmetrie. In der Formulierung des Problems kann dieser Effekt mit einem zusätzlichen Term im Hamiltonian, dem sogenannten Kristallfeldoperator H_{CF} , berücksichtigt werden, dessen Beitrag häufig als kleine Störung des ursprünglichen kugelsymmetrischen Hamiltonians H_0 angenommen werden kann.

Ein Beispiel, an dem man eben diesen Kristallfeld-Effekt beobachten kann ist das System LaTiO_3 . Das Titan hat in dieser Verbindung die Valenz +3 und damit besetzt näherungsweise ein Elektron die fünf Orbitale der 3d-Schalen (d.h. $n = 3, l = 2$) des Titans. Um das Titan sind sechs Sauerstoff-Liganden in einem Oktaeder angeordnet - damit ist das Kristallfeld Potential für das Titan kubisch und lässt sich in Kugelkoordinaten folgendermaßen schreiben:

$$H_{CF}(\theta, \phi) = \lambda \left(\frac{21\sqrt{4\pi}}{3} \right) \left[Y_4^0(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{5}{14}} (Y_4^4(\theta, \phi) + Y_4^{-4}(\theta, \phi)) \right],$$

wobei wir die Standardnotation für die Kugelflächenfunktionen benutzen, und der Parameter λ als sehr klein im Vergleich mit allen anderen Energieskalen des Problems angenommen werden kann (wir vernachlässigen hier alle relativistische Korrekturen wie z.B. die Spin-Bahn Kopplung, die für dieses System noch viel kleiner sind) .

- Berechne alle Matrixelemente des Operators H_{CF} im $3d$ Unterraum, der von den fünf $Y_2^m(\theta, \phi)$ aufgespannt wird. [Bemerkungen: Überlege zunächst welche Auswahlregeln es für m gibt. Für die Integrale über die Variable θ können auch Computer oder Tabellen verwendet werden.]
- Berechne in erster Ordnung (entarteter) Störungstheorie die Energie-Aufspaltung der ursprünglich entarteten $3d$ Orbitale aufgrund des kubischen Kristallfeldes.
- Berechne nun die Eigenvektoren von H_{CF} im $3d$ Unterraum als Funktion der $Y_2^m(\theta, \phi)$.
- Mache dann für die noch entarteten Eigenvektoren Linearkombinationen dieser Eigenvektoren, so dass die korrespondierende Wellenfunktionen reell werden.

8. Ritzsches Variationsverfahren: Geb. Zustände in $d = 1$ 2+2=4 Punkte

Betrachte eine Wellenfunktion über ganz \mathbb{R} , d.h. $x \in (-\infty, +\infty)$. Ein Potential $V(x)$ heißt *attraktiv*, wenn $V(\infty) = V(-\infty) \equiv V_\infty$ und $V(x) < V_\infty$ für alle $|x| < \infty$.

- a) Zeige: Jedes attraktive Potential hat mindestens einen gebundenen Zustand, d.h., $E_0 < V_\infty$ indem das Ritzsche Variationsverfahren für

$$\psi_\alpha(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}},$$

bezüglich $H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$ angewandt wird.

- b) Warum kann man das obige Argument (entsprechend modifiziert) nicht benutzen, um die Existenz gebundener Zustände in höheren Dimensionen ($d \geq 2$) zu beweisen?