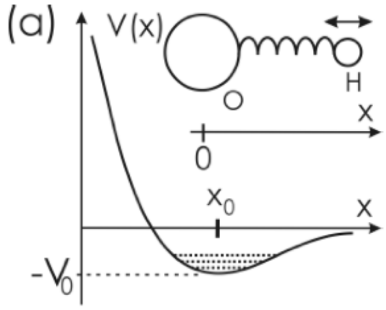
ÜBUNGSBLATT 3

Beispiel 9 (Harmonischer Oszillator)



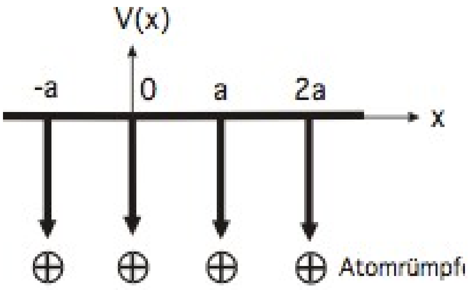
(a) Im OH-Molekül kann das Wasserstoff-Atom um seine Ruhelage bei $x=x_0$ schwingen. Es „sieht" dabei das in Abbildung (a) gezeichnete Potential $V(x)=-A/x^k+B/x^l$, wobei die Konstanten A, B, k und l empirisch ermittelt werden. Die Bewegung des Sauerstoff Atoms kann aufgrund seiner großen Masse vernachlässigt werden. Zeigen Sie, dass man folgenden Näherungsausdruck für die *Vibrationseigenenergien* des OH-Moleküls erhält:

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{\sqrt{m}}\sqrt{Bl(l+1)x_0^{-l-2} - Ak(k+1)x_0^{-k-2}} - V_0$$

Hinweis: Verlegen Sie den Koordinatenursprung nach $x = x0$ und entwickeln Sie $V(x)$ in eine Taylorreihe. Brechen Sie die Reihenentwicklung nach dem quadratischen Glied ab. Beachten Sie, dass die *harmonische Schrödingergleichung:*

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 \varphi_n = E_n\varphi_n$$ folgende Eigenwerte besitzt: $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$.

Beispiel 10 (Kronig Penney Modell):



Das Potential der Rumpfatome in einem Halbleiterkristall kann durch ein einfaches periodisches Delta-Potential angenähert werden:

$$V(x) = -V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)$$

(a) Wie lautet die Lösung der Schrödingergleichung im Gebiet $0 \le x \le a$?

(b) Verwenden Sie das Bloch-Theorem um die Wellenfunktion im Gebiet $a \le x \le 2a$ zu erhalten!

(c) Zeigen Sie, dass man aus den Stetigkeitsbedingungen (z.B. für die Stelle 0 und analog für die Stelle a)

$$\Psi(0_+) = \Psi(0_-) \quad \text{und} \quad \Psi'(0_+) - \Psi'(0_-) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\Psi(0)$$

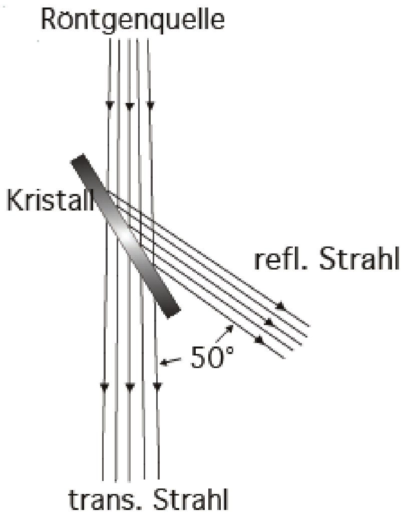
folgende Bestimmungsgleichung für die erlaubten Energiebänder ableiten kann:

$$\cos(ka) = \cos(\alpha a) - \frac{maV_0}{\hbar^2}\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} \qquad \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Hinweis: Integrieren Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung von $-a$ bis a und bilden Sie dann den $\lim_{a\to 0}$. Beachten Sie, dass $\int \delta(x-x_0) f(x)dx = f(x_0)$.

(d) Zeichnen Sie schematisch das $E(k)$ Diagramm.

Beispiel 11 (Bragg-Bedingung):



Breitbandige Röntgenstrahlung trifft auf einen einfach kubischen Kristall mit einer Gitterkonstante von 4 Å. Der Winkel zwischen dem transmittierten und dem reflektierten Strahl beträgt 50°.

(a) Leiten Sie die Bragg-Bedingung ab.
(b) Wie groß ist die Energie der reflektierten Röntgenphotonen für die 3 ersten Peaks ?

Beispiel 12 (Phononen):

Gegeben sei eine unendlich lange lineare Anordnung von Massenpunkten der Masse M, welche in Ruhelage den gegenseitigen Abstand a aufweisen. Jeder Massenpunkt sei mit seinen beiden nächsten Nachbarn durch eine Kraftkonstante K gekoppelt. Die Massenpunkte sollen sich longitudinal auslenken lassen, wobei die Auslenkung des Massenpunktes n aus seiner Ruhelage durch die Koordinate u_n beschrieben wird.

(a) Stellen Sie für die Koordinate u_n einer longitudinalen Auslenkung des Massenpunktes n die Bewegungsgleichung auf!

(b) Leiten Sie unter Verwendung des Lösungsansatzes $\mathrm{u}_\mathrm{n} = A\exp(i(nka - \omega t))$

die Dispersionsrelation $\omega(k)$ der Phononen her. Hinweis: $\left[1\text{-}\cos(\mathrm{x})\right]/2 = \sin^2(x/2)$

(c) Untersuchen Sie die Dispersionsrelation für $k \to 0$ und leiten Sie daraus einen Ausdruck für die Schallgeschwindigkeit ab.

(d) Diskutieren Sie das Verhalten der Gruppengeschwindigkeit für $k \to \pm\pi / a$