Übungen zur theoretischen Festkörperphysik I - Zettel 4

Wintersemester 11/12 Abgabe: 13.12.

Aufgabe 12: Spezifische Wärme bei tiefen Temperaturen in 1-D (3P)

Die innere Energie der Phononen ist gegeben als

$$E = \sum_{j,\vec{q}} \hbar\omega_j(\vec{q}) \left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_j(\vec{q})}{k_B T}} - 1} + \frac{1}{2} \right),$$

wobei die temperaturunabhängige Nullpunktsenergie $E_0 = \sum_{j,\vec{q}} \frac{1}{2}\hbar\omega_j(\vec{q})$ hier nicht weiter berücksichtigt werden muss. Betrachten Sie den 1-dimensionalen Fall (z.B. lineare Kette) im Grenzfall tiefer Temperaturen. Welche Phononen sind hier wichtig und wie lautet ihre Dispersionsrelation (Benutzen Sie die übliche Näherung)? Berechnen Sie für diesen Fall die innere Energie und die Wärmekapazität. Wie ändert sich die Wärmekapazität im Gegensatz zum 3-dimensionalen Fall? Vorgehen: Vollziehen Sie zunächst den Übergang der Summe zum Integral. Machen Sie eine geeigente Substitution und dehnen Sie eine Integralgrenze ins Unendliche aus (Bedingung?). Schlagen Sie das zu berechnende Integral nach.

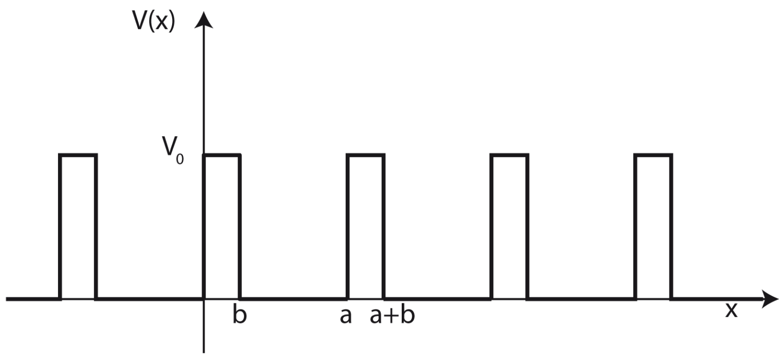
Aufgabe 13: Korrekturen zur spezifischen Wärme bei hohen Temperaturen (3P)

Betrachten Sie die innere Energie (siehe vorherige Aufgabe) und Wärmekapazität im Grenzfall hoher Temperaturen. Entwickeln Sie dafür die Exponential-Funktion bis zur 3. Ordnung. Bestimmen die Korrekturen zum Dulong-Petit-Gesetz. Hinweis: Die Taylorentwicklung $(1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{6}x^2)^{-1} \approx 1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{12}x^2$ für kleine x ist hilfreich.

Aufgabe 14: Anharmonische Korrekturen (4P)

Der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators sei gestört durch $H_1 = -\alpha x^3$. Berechnen Sie den Erwartungswert ${}^{(1)}\langle n|x|n\rangle^{(1)}$, wobei $|n\rangle^{(1)}$ die Korrektur des n-ten Energieeigenzustands in 1. Ordnung Störungstheorie ist. Es ist sinnvoll in dem Erwartungswert zunächst die allgemeine Formel für $|n\rangle^{(1)}$ einzusetzen. Benutzen Sie für H_1 und x die Darstellung des Ortsoperators $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b + b^\dagger)$.

Aufgabe 15: Kronig-Penney-Modell (10P)



Das Kronig-Penney-Modell nähert das Potential für die Valenz-Elektronen in einem Festkörper durch Potentialtöpfe der Tiefe V_0 und der Breite $a - b$ an. Wir wollen dieses Modell unter der Vereinfachung lösen, dass man das Potential als δ-Kamm schreiben kann mit

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_0 \delta(x - na)$$

a) Welchen Vereinfachungen führen zum δ-Kamm? Schreiben Sie die zu lösende Schrödinger-Gleichung auf.

b) Wählen Sie einen Ansatz für die Wellenfunktion ψ_n im n-ten Bereichen zwischen den δ-Peaks.

c) Stellen Sie die Anschlussbedingungen für δ-förmige Potentiale auf:

$$\psi(na + \varepsilon) - \psi(na - \varepsilon) = 0$$

$$\psi'(na + \varepsilon) - \psi'(na - \varepsilon) = \frac{2mU_0}{\hbar^2}\psi(na)$$

d) Formulieren Sie das Bloch-Theorem und stellen Sie damit eine Beziehung zwischen den Koeffizienten im $(n + 1)$-ten Bereich und im n-ten Bereich auf.

e) Zeigen Sie, dass die Anschlussbedingungen auf eine Gleichung folgender Form führen:

$$cos(y) = cos(z) + a\frac{sin(z)}{z}$$

Wie lauten a, y und z?

f) Zeichnen Sie die rechte Seite der Gleichung und diskutieren Sie mögliche Lösungen. Skizzieren Sie grob das daraus resultierende Bänderschema. Was passiert im Fall $U_0 = 0$?