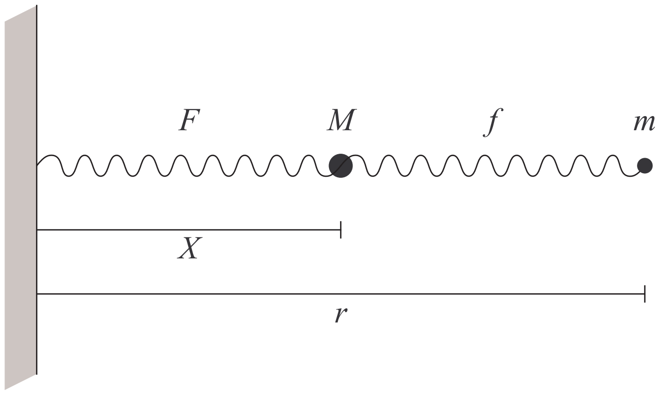
1. Übung zur Einführung in die Festkörpertheorie (WS 2013/14) **Prof. Krüger**
Ausgabedatum: 22.10.2013 Abgabedatum: 29.10.2013

Aufgabe 1: Dynamik zweier gekoppelter Massen (4 Punkte)

Gegeben sei die Hamiltonfunktion zweier Teilchen in einer Dimension:

$$H = \frac{P^2}{2\,M} + \frac{p^2}{2\,m} + \frac{1}{2}\,F\,X^2 + \frac{1}{2}\,f\,(X - r)^2 \,.$$



a) Berechnen Sie klassisch die Frequenzen der Eigenschwingungen des Systems.

b) Geben Sie den Hamiltonoperator und ohne große Rechnung die Eigenwerte des entsprechenden quantenmechanischen Systems an.

c) Die Masse m sei viel kleiner als die Masse M. Berechnen Sie die Eigenwerte von $\hat{H}$ analog zur Born-Oppenheimer-Näherung. Vernachlässigen Sie dazu im ersten Schritt die Bewegung der schweren Masse M und geben Sie die Eigenwerte des entsprechenden Hamiltonoperators an. Lösen Sie dann das Problem der Bewegung der schweren Masse M im gerade berechneten „effektiven Potential“.

d) Vergleichen Sie die Ergebnisse aus b) und c). Benutzen Sie dabei

$$\omega = \sqrt{\frac{f}{m}}\,, \qquad \lambda = \sqrt{\frac{F}{M}} \qquad \text{und} \qquad \kappa = \sqrt[4]{\frac{m}{M}}\,.$$

Aufgabe 2: Fouriertransformation (2 Punkte)

a) Berechnen Sie die Fouriertransformierte $\tilde{v}\,(\vec{q}\,) = \frac{1}{\Omega}\int\limits_{\Omega} v\,(\vec{r}\,)\,\mathrm{e}^{-i\,\vec{q}\,\vec{r}}\,d^3\,r$ des Yukawa-Potentials

$$v\,(r) = \frac{\mathrm{e}^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0}\,\frac{\mathrm{e}^{-\gamma\,r}}{r}$$

in einer Born-von Kármán-Zelle mit Volumen Ω. Ersetzen Sie dabei das Integrationsgebiet durch eine Kugel mit Radius $R \to \infty$.

b) Im Grenzfall $\gamma \to 0$ geht das Yukawa-Potential in das Coulomb-Potential über. Geben Sie die Fouriertransformierte an.

Aufgabe 3: Ewald-Methode (4 Punkte)

Bei der Berechnung der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Atomkernen in einem Festkörper ist eine direkte Auswertung der Summe über die Gittervektoren aufgrund der Langreichweitigkeit des Coulomb-Potentials extrem aufwendig. In einem auf Ewald zurückgehenden Verfahren stellt man das Coulomb-Potential mit Hilfe einer Summe aus Fehlerfunktionen $\mathrm{erf}\,(x)$ und $\mathrm{erf}\,c\,(x)$ dar. Der eine Term wird im Fourierraum und der andere im Ortsraum ausgewertet.

a) Zeigen Sie, dass sich die Summe $S = \sum_j{}' \frac{1}{|\vec{a} - \vec{R}_j|}$ in der Form $S = S_1 + S_2$ mit

$$S_1 = \sum_j{}' \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta \mathrm{e}^{-|\vec{a} - \vec{R}_j|^2 x^2} \, dx \; ; \qquad S_2 = \sum_j{}' \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_\eta^\infty \mathrm{e}^{-|\vec{a} - \vec{R}_j|^2 x^2} \, dx$$

schreiben lässt. Dabei ist $\vec{a}$ die Differenz von zwei Basisvektoren $\vec{\tau}_\nu - \vec{\tau}_{\nu'}$, $\vec{R}_j$ ist ein Gittervektor und η ist eine Zahl zwischen 0 und ∞, die für die numerische Auswertung geeignet gewählt werden kann. Der Strich an der Summe über alle $\vec{R}_j$ deutet an, dass der Term $\vec{a} = \vec{R}_j$ ausgeschlossen ist. Sie können bei ihrem Beweis auf die angegebenen Integrale zurückgreifen.

b) Der Fall $\vec{a} = \vec{R}_j$ kann nur für $\vec{a} = 0$ auftreten. Zeigen Sie, dass S_1 daher durch eine uneingeschränkte Summe der Form

$$S_1 = \sum_j \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta \mathrm{e}^{-|\vec{a} - \vec{R}_j|^2 x^2} \, dx - \delta_{\vec{a},\vec{0}} \cdot \frac{2\,\eta}{\sqrt{\pi}}$$

angeben lässt.

c) Stellen Sie in S_1 die Gaussfunktion durch ihre Fouriertransformierte dar, führen Sie die Summe über j aus und werten Sie das Integral über die Variable x aus.

d) Stellen Sie den Term S_2 unter Verwendung von $\mathrm{erf}\,c\,(\eta\,|\vec{a} - \vec{R}_j|)$ dar.

e) Welche Vorteile bietet die numerische Auswertung von S_1 und S_2 gegenüber einer direkten Summation in S?

Anmerkung: Der in S_1 auftretende divergente Term mit $|\vec{G}| = 0$ wird durch analoge Terme in der Elektron-Elektron- und der Kern-Elektron-Wechselwirkung kompensiert.

Nützliche Relationen:

i) $$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-b^2 x^2} \, dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\,b}$$

ii) $$\mathrm{erf}\,(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \mathrm{e}^{-t^2} \, dt$$

iii) $$\mathrm{erf}\,c\,(y) = 1 - \mathrm{erf}\,(y)$$

iv) $$\sum_j \mathrm{e}^{-|\vec{a} - \vec{R}_j|^2 x^2} = \sum_j \frac{1}{\Omega} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{x^3} \sum_{\vec{G}} \mathrm{e}^{i\,\vec{G}\cdot(\vec{a} - \vec{R}_j)} \cdot \mathrm{e}^{-\frac{G^2}{4\,x^2}}$$

Ω ist das Volumen der Born-von Kármán-Zelle. In dieser Zelle gibt es N_{Zelle} Gittervektoren. Es gilt $\Omega_0 = \Omega / N_{\mathrm{Zelle}}$.