Übungszettel 12 - Die dreidimensionale Schrödingergleichung (Abgabe: Vorlesung 23.01.2018 *oder* 24.01.2018 bis 11:15 im Fach)

Aufgabe 1 - Ein einfaches Festkörpermodell (30 Punkte)

In dieser Aufgabe betrachten wir die dreidimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung eines Masseteilchens der Masse m (mit $\vec{r} = (x, y, z)$),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \,, \tag{1}$$

in folgendem Potential,

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq d \text{ und } 0 \leq y \leq d \text{ und } 0 \leq z \leq d \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} .$$

(a) Benutze folgenden Separationsansatz für die Lösungswellenfunktion,

$$\psi(\vec{r}) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z) \,,$$

und stelle die effektiven eindimensionale Schrödingergleichungen für die Funktionen $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$ und $\psi_z(z)$ auf. Welchem eindimensionalen Problem entsprechen diese Gleichungen?

(b) Gib die allgemeine Form für die Eigenfunktionen und Eigenenergien an, indem du die bekannten Lösungen für $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$ und $\psi_z(z)$ in $\psi(\vec{r})$ einsetzt. Prüfe explizit, ob die dreidimensionale Schrödingergleichung auch tatsächlich von deinen Lösungen erfüllt wird sowie, dass Normierung und alle Randbedingungen erfüllt werden.
Hinweis: Die Eigenfunktionen für $\psi_x(x)$ lauten

$$\psi_x(x) = \sqrt{\frac{2}{d}}\sin(k_x x) \,, \quad k_x = \frac{n_x \pi}{d},\ n_x \in \mathbb{N}\setminus\{0\} \,.$$

(c) Schreibe die ersten 5 verschiedenen Energieeigenwerte explizit auf. Existieren Entartungen? Wenn ja, wie vielfach ist die Entartung jeweils für diese Energieeigenwerte?
Hinweis: Eine Entartung liegt vor, wenn zu einem Energieeigenwert mehrere verschiedene Lösungswellenfunktionen existieren.

(d) Schreibe die erlaubten Energieeigenwerte in der Form

$$E\left(\vec{k}\right) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \,, \tag{2}$$

mit $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$. Bestimme den Vektor $\vec{k}$ und berechne die erlaubten Werte für dessen Komponenten. Berechne den Abstand in jeder Richtung zwischen je zwei Punkten im $\vec{k}$-Raum, die einen erlaubten Energieeigenwert repräsentieren. Welches "Volumen" V_k könnte man somit einem einzelnen Zustand einräumen? Was passiert ganz allgemein mit dem Abstand der Energieeigenwerte für den Fall $d \to \infty$?

(e) Angenommen man betrachtet alle Lösungswellenfunktionen unterhalb einer bestimmten Energie E. Wie kann man dies im $\vec{k}$-Raum visualisieren? Erläutere, warum mit zunehmendem E progressiv immer mehr Zustände dazukommen, wenn man die Energie um einen kleinen Betrag dE auf den Wert $E + dE$ erhöht. Eine charakteristische Größe für dieses Konzept ist die so genannte Zustandsdichte D, welche als Ableitung der Anzahl der Zustände Z definiert ist. Berechne das Differential der Anzahl der Zustände über die Relation

$$dZ' = \frac{1}{8}\frac{V(k + dk) - V(k)}{V_k} = \frac{1}{8V_k}\frac{dV(k)}{dk}dk \,. \tag{3}$$

Hierbei ist $V(k)$ das Volumen aller Zustände im $\vec{k}$-Raum bis zur maximalen $\vec{k}$-Vektor-Länge k - V_k wurde in Teilaufgabe (d) bestimmt. Motiviere den Vorfaktor $\frac{1}{8}$ in Gleichung (3)! Die Zahl der Zustände geht mit größer werdenden Volumen d^3 des Potentialtopfs gegen unendlich. Wir normieren daher das Resultat und betrachten von nun an die Anzahl der Zustände pro Volumen, dZ,

$$dZ = \frac{dZ'}{d^3} \,.$$

(f) Forme das Differential dk in ein Differential dE mit Hilfe von Gleichung (2) um. Man erhält dann für die Zustandsdichte als Funktion der Energie folgendes Resultat,

$$\frac{dZ}{dE} = D(E) \Longleftrightarrow dZ = D(E)\, dE\,.$$

Bestimme und skizziere die Zustandsdichte $D(E)$ sowie die Anzahl der Zustände pro Volumen $Z(E)$.

Aufgabe 2 - Sommerfeldsche Polynommethode (30 Punkte)

In dieser Aufgabe betrachten wir erneut die dreidimensionale zeitunabhängige Schrödingergleichung aus Gleichung (1), dieses Mal mit folgendem Potential ($\gamma \neq 0$),

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m\gamma^2 r^2\,.$$

(a) Benutze einen Separationsansatz in Kugelkoordinaten der Form

$$\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\theta, \varphi)\ ,$$

mit den Kugelflächenfunktionen $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$, um folgende Differentialgleichung für $R_{nl}(r)$ zu erhalten,

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{d}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_{nl} - \frac{m\gamma^2}{2} r^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]\right] R_{nl}(r) = 0\,.$$

(b) Wir definieren die skalierte Wellenfunktion $u_{nl}(r) \equiv rR_{nl}(r)$ sowie $\beta = \sqrt{\frac{m\gamma}{\hbar}}$ und $\epsilon_{nl} \equiv \frac{2mE_{nl}}{\hbar^2}$. Stelle die Differentialgleichung für $u_{nl}(r)$ auf.

(c) Notiere die Randbedingung für $u_{nl}(0)$ sowie das Verhalten der Differentialgleichung für $u_{nl}(r)$ für $r \to \infty$. Zeige, dass hieraus folgender Ansatz für $u_{nl}(r)$ folgt,

$$u_{nl}(r) = e^{-\frac{\beta^2 r^2}{2}} y_{nl}(r)\ ,$$

und zeige folgende Form der Differentialgleichung für das polynomiale $y_{nl}(r)$,

$$\frac{d^2}{dr^2} y_{nl}(r) - 2\beta^2 r \frac{d}{dr} y_{nl}(r) + \left[\epsilon_{nl} - \beta^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] y_{nl}(r) = 0\,. \tag{4}$$

Wie lautet die Randbedingung am Koordinatenursprung für $y_{nl}(r)$?

(d) Zeige, dass mit folgendem polynomialen Reihenansatz (mit $s \in \mathbb{Z}$, $a_q \in \mathbb{R}$ und $a_0 \neq 0$),

$$y_{nl}(r) = r^s \sum_{q=0}^{\infty} a_q r^q\ ,$$

durch Einsetzen in Gleichung (4) folgende Bedingungen folgen,

$$s = l+1, \qquad a_1 = 0, \qquad \forall q \in \mathbb{N}_0:\ (q+2)(q+2l+3)\, a_{q+2} = \left[(2q+2l+3)\beta^2 - \epsilon_{nl}\right] a_q\,.$$

Hinweis: Schaue dir nach dem Einsetzen zunächst explizit die niedrigsten beiden polynomialen Ordnungen in r an (beachte, dass $a_0 \neq 0$).

(e) Zeige, dass, falls ein gerades $q_{\max}$ existiert mit $a_{q_{\max}} = 0$, alle a_q mit $q \geq q_{\max}$ gleich null sind. Zeige, dass die Relation $\frac{a_{q+2}}{a_q} \overset{q\to\infty}{\longrightarrow} \frac{2\beta^2}{q}$ gilt und somit, falls kein solches $q_{\max}$ existiert würde, das asymptotische Verhalten $y_{nl}(r\to\infty) \longrightarrow r^{l+1} e^{\beta^2 r^2}$ auftritt.
Hinweis: Zeige und benutze, dass $e^{\beta^2 r^2} = \sum_{q \text{ gerade}} \frac{(\beta r)^q}{(q/2)!}$.

(f) Begründe, warum aus Teilaufgabe (*e*) folgt, dass physikalisch sinnvolle Lösungen ein endliches $q_{\max}$ besitzen müssen und man daraus schlussfolgern kann, dass die skalierten Eigenenergien ϵ_{nl} folgende Form haben,

$$\epsilon_{nl} = (2n + 2l + 3)\,\beta^2\ ,$$

mit $n \in \mathbb{N}_0$ gerade und $l \in \mathbb{N}_0$. Zeige, dass damit das volle Spektrum des Hamiltonoperators durch die Energien

$$E_k = \hbar\gamma\left(k + \frac{3}{2}\right)\ ,$$

mit $k \in \mathbb{N}_0$ gegeben ist.