

Übungen zur Computerphysik

SS 2020

T. Luu, A. Nogga, M. Petschlies, A. Wirzba

Hausaufgabe 3

Abgabe: 09.06.2020

Beachten Sie, dass **zwei zusätzliche Punkte** für die Kommentierung und den Stil des Codes vergeben werden.

H.7: Eigenwerte linearer Differentialoperatoren

Betrachten Sie das bekannte Randwertproblem

$$u''(x) + g(x) u(x) = 0, \quad (1)$$

$$u(t_0) = u_0,$$

$$u(t_1) = u_1. \quad (2)$$

Gl. (1,2) können wir auffassen als die Anwendung eines linearen Operators D auf die Funktion u : $Du = u'' + gu$ (+ Randbedingungen).

Von besonderem Interesse sind Eigenwerte (das Spektrum) und Eigenfunktionen des linearen Differentialoperators, und insbesondere Paare aus Funktionen $(\lambda, u_\lambda(x))$, die die Eigenwertgleichung

$$Du_\lambda - \lambda u_\lambda = 0 \quad (3)$$

und die homogenen Randbedingungen Gl. (2) mit $u_0 = 0 = u_1$ erfüllen.

1. (1 P) Welche Bedeutung haben die Eigenfunktionen zu D mit homogenen Randbedingungen $u_0 = 0 = u_1$ für die Lösungen des inhomogenen Systems

$$Du(x) = \lambda u(x) + f(x), \quad u(t_0) = a, u(t_1) = b? \quad (4)$$

2. (2 P) Bestimmen Sie die 10 betragsmäßig kleinsten Werte im Spektrum von D für den Fall $g(x) \equiv 0$ und $t_0 = 0, t_1 = 60, u_0 = 1, u_1 = 0$ numerisch mit Hilfe des Numerov-Verfahrens. Benutzen Sie das Maximum der Amplitude der Lösung zur Identifikation der Eigenwerte. Warum funktioniert dieses Kriterium? Vergleichen Sie mit der analytischen Lösung.

H.8: Kronig-Penney Model

Die quantenmechanischen Zustände der Valenzelektronen eines kristallinen Festkörpers werden durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x), \quad (5)$$

wobei ψ die Wellenfunktion ist, m_e die Elektronmasse, \hbar das Plancksche Wirkungsquantum und V das durch die Ionen im Kristallgitter erzeugte Potential. Für stationäre Zustände mit Energie E gilt die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion

$$\psi(t, x) = e^{-iEt/\hbar} \phi(x) \quad (6)$$

und die Propagation des Elektrons durch den Kristall ist definiert durch die Dichtefunktion der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\phi(x)|^2$. In geeignet gewählten Einheiten erhalten wir also die Gleichung

$$-\frac{1}{2} \Delta \phi(x) + V(x) \phi(x) = \lambda \phi(x). \quad (7)$$

Ein 1-dimensionales Modell für das Potential eines Kristallgitters der Länge L (L ganzzahlig) wird gegeben durch das periodische Potential

$$V_{\text{per}}(x) = 60 (\cos(\pi x))^{16}. \quad (8)$$

Wir erzwingen durch unendlich hohe Potentialwälle bei $x = 0$ und $x = L$ die Randbedingungen für die Wellenfunktion $\phi(0) = 0 = \phi(L)$, d.h.

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0, \\ V_{\text{per}}(x) & 0 < x < L, \\ \infty & x \geq L. \end{cases} \quad (9)$$

1. (8 P) Bestimmen Sie die Energieeigenwerte λ für $L = 8$ im Bereich $0 \lesssim \lambda \lesssim \max \{V_{\text{per}}(x)\}$ mit Hilfe des Numerov-Verfahrens. Verifizieren Sie die Bandstruktur des Spektrums: Die Eigenwerte wachsen nicht kontinuierlich, sondern sind gruppiert mit Stufen zwischen den Gruppen. Diese sogenannten Bandlücken stellen verbotene Energiebereiche für ein Elektron dar. Plotten Sie jeweils die auf 1 normierte ¹ Wellenfunktion für den Zustand ober- und unterhalb der Bandlücke.
2. (3 P) Die kleine Länge L des Kristalls ergibt eine systematische Unsicherheit (finite size effect) gegenüber einer realistischen Kristallgröße. Prüfen Sie die Abhängigkeit der Bandstruktur aus Aufgabenteil 1 von der Länge L für $L = 16, 32, \dots$
3. (4 P) Untersuchen Sie den Einfluß eines äußeren konstanten elektrischen Feldes $-\epsilon$ ($\epsilon > 0$) auf die Struktur des Spektrums. ² Stellen Sie die ersten beiden Bandlücken als Funktion der Feldstärke ϵ dar.

¹Norm $\|\psi\|^2 = \int_0^L |\psi(x)|^2 dx$.

²Negative Ladung des Elektrons, $q_e = -1$; zusätzliches Potential $V_e(x) = x\epsilon$