Übungen zu „Theorie ungeordneter Systeme“

Prof. Walter Schirmacher,WS 2009/10

Blatt 4

1) Freie Elektronen mit periodischen Randbedingungen und Fouriertransformation

Betrachten Sie freie Elektronen in einem kubischen Kasten (Volumen $V = L^3$) mit der stationären Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}) \qquad (*)$$

a) Lösen Sie (*) mit periodischen Randbedingungen

$$\psi_n(x,y,z) = \psi_n(x+L,y,z) = \psi_n(x,y+L,z) = \psi_n(x,y,z+L)\,,$$

d.h. Bestimmen Sie Eigenwerte E_n, die im Kasten normierten Eigenvektoren ψ_n, sowie die Wellenzahlen $\mathbf{k}_n$.

b) Zeigen Sie, dass für große L gilt

$$\sum_n f(\mathbf{k}_n) \equiv \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3\mathbf{k} f(\mathbf{k})\,.$$

2) Verunreinigungspotential

Eine Verunreinigung am Ort $\mathbf{r}_i$ habe das Elektron- Verunreinigungs-Potential

$$V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} e^{-\lambda|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}$$

a) Berechnen Sie das störungstheoretische Matrixelement $< \mathbf{k}_1 | V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) | \mathbf{k}_2 >$ mit den Wellenfunktion aus 1).

b) Berechnen Sie den Streuquerschnitt in Bornscher Näherung für n Verunreinigungen an den Orten $\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left[\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right]^2 \Big| < \mathbf{k}_1 | \sum_{i=1}^{n} V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) | \mathbf{k}_2 > \Big|^2$$

2) Spektralfunktion und Lehmann-Darstellung

Die Niveaudichte von Elektronen mit Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r})$$

ist definiert durch

$$g(E) = \frac{1}{N}\delta(E-E_n) = \pm\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\Big\{G(z_\pm)\Big\}$$

wobei n die Anzahl der Eigenwerte und $z_\pm = E \mp \epsilon$ ist. $G(z) = \frac{1}{N}\mathrm{Sp}\big\{[1-\mathcal{H}]^{-1}\big\}$ heißt *Spektralfunktion.*

a) Zeigen Sie mit Hilfe der Ergebnisse von Blatt 3, dass sich $G(z)$ folgendermassen darstellen lässt (Lehmann-Darstellung)

$$G(z) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E \frac{n(E)}{z-E}$$

b) Berechnen Sie die asymptotische Form von $G(z)$ bis zur 2. Ordnung in z^{-1} für $E \to -\infty$ und $E \to +\infty$ unter der Annahme, dass das Spektrum begrenzt ist,
d.h. $E_n^{\min} > -\infty; E_n^{\max} < +\infty$.

c) Überzeugen Sie sich davon, dass die Hubbardsche Spektralfunktion

$$G(z) = \frac{2}{z \pm \sqrt{z^2-1}}$$

ein Spektrum $n(E)$ der Form eines Halkreises hat und verifizieren Sie die unter b) hergeleiteten Eigenschaften. Modifizieren Sie die Funktion so, dass sich eine Halbellipse mit einstellbarer Bandbreite B ergibt.