Übungsaufgaben zu Physik IV (SS 98)

Blatt 9

Aufgabe 9.1 (L:0): Debye-Näherung

Berechnen Sie den Beitrag der Gitterschwingungen zur spezifischen Wärme eines Festkörpers unter Verwendung der DEBYE-Näherung. Diskutieren Sie insbesondere die Grenzfälle sehr hoher und sehr niedriger Temperatur. *Hinweis:* $\int_0^\infty \frac{x^3}{\exp(x)-1} = \frac{\pi^4}{15}$.

Aufgabe 9.2 (L:0;D:0): Metallische Bindung

Wie groß ist die Grundzustands-Energie eines Elektrons, welches in einem Würfel der Kantenlänge a eingesperrt ist? Für einen kubisch primitiven Kristall, der aus $N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ Elementarzellen besteht, vergleiche man die Grundzustands-Energie des Elektronensystems, wenn

a) jedes Elektron für sich in einem Würfel a^3 eingesperrt ist,

b) sich jedes Elektron im gesamten Kristall der Kantenlänge $N_1 a \cdot N_2 a \cdot N_3 a$ bewegen kann.

Diskutieren Sie auch ein zweiwertiges Metall. *Hinweis:* Für b) arbeitet man zweckmäßigerweise mit periodischen Randbedingungen und beachtet das Pauli-Prinzip.

Aufgabe 9.3 (L:12): Brechungsindex für Röntgenstrahlung

Berechnen Sie den Brechungsindex von metallischem Aluminium für 20 keV Röntgenstrahlung. Da die Bindungsenergie aller Elektronen sehr viel kleiner als die Quantenenergie der Röntgenstrahlung ist, kann die Resonanzfrequenz ω_0 in der Dispersionsformel vernachlässigt werden (DRUDE-Modell). Aluminium kristallisiert in einer kubisch-flächenzentrierten Struktur mit einer Gitterkonstanten $a = 4,05\,\text{Å}$.

Aufgabe 9.4 (L:18;D:18): Auslöschungsregeln

Für welche Indexkombinationen $h\,k\,l$ verschwindet der Strukturfaktor F_{hkl}, wenn die Kristallstruktur

a) eine Gleitspiegelebene

b) eine 4-zählige Schraubenachse

enthält. Aus der Existenz einer Gleitspiegelebene mit dem Translationsvektor $\frac{1}{2}\vec{b}$ verknüpft mit einer Spiegelung an der x-y-Ebene folgt, dass zu jedem Atom j mit den Koordinaten (ξ_j, η_j, ζ_j) ein zweites mit den Koordinaten $(\xi_j, \eta_j + \frac{1}{2}, -\zeta_j)$ existiert. Fassen Sie diese bei der Rechnung paarweise zusammen! Wie lautet die entsprechende Bedingung für eine 4-zählige Schraubenachse in $\vec{c}$-Richtung? *Hinweis:* Betrachten Sie speziell die Reflexe $h\,k\,0$ (für Teil a) und $0\,0\,l$ (für Teil b).

Aufgabe 9.5 (D:0): Skalarprodukt und Hermitizität im endlichdimensionalen Vektorraum

Man betrachte den N-Dimensionalen Raum $\mathbb{C}^N$ der komplexwertigen Spaltenvektoren ($N \times 1$-Matrizen)

$$\underset{\sim}{a} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} \quad , \alpha_i \in \mathbb{C}.$$

a) Ein Skalarprodukt $\langle \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{b} \rangle$ in $\mathbb{C}^N$ ist definiert durch das Matrixprodukt $\underset{\sim}{a}^\dagger \underset{\sim}{b}$, wobei $\underset{\sim}{a}^\dagger = (\underset{\sim}{a}^\top)^*$ die zu $\underset{\sim}{a}$ transponierte und komplex-konjugierte $1 \times N$-Matrix (Zeilenvektor) ist. Schreiben Sie dieses Skalarprodukt in Komponenten aus und verifizieren Sie die Eigenschaften:

(i) $\langle \underset{\sim}{a}, \gamma_1 \underset{\sim}{b}_1 + \gamma_2 \underset{\sim}{b}_2 \rangle = \gamma_1 \langle \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{b}_1 \rangle + \gamma_2 \langle \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{b}_2 \rangle$
$\underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{b}_1, \underset{\sim}{b}_2 \in \mathbb{C}^N, \gamma_1, \gamma_2 \in \mathbb{C}$ (Linearität)

(ii) $\langle \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{b} \rangle = (\langle \underset{\sim}{b}, \underset{\sim}{a} \rangle)^*$ (Symmetrie bis auf Komplex-Konjugation)

(iii) $||\underset{\sim}{a}||^2 := \langle \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{a} \rangle$ ist positiv reell (≥ 0),
wobei $\langle \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{a} \rangle = 0 \Leftrightarrow \underset{\sim}{a} = 0$ (positiv und nicht entartet)

Zeigen Sie, dass aus (i) und (ii) folgt:
$\langle \gamma_1 \underset{\sim}{b}_1 + \gamma_2 \underset{\sim}{b}_2, \underset{\sim}{a} \rangle = \gamma_1^* \langle \underset{\sim}{b}_1, \underset{\sim}{a} \rangle + \gamma_2^* \langle \underset{\sim}{b}_2, \underset{\sim}{a} \rangle$ (Antilinearität)

b) Es sei A ein Endomorphismus von $\mathbb{C}^N$, d.h. eine $N \times N$-Matrix (α_{ij}) mit Einträgen aus $\mathbb{C}$. Ein Endomorphismus heißt zu A adjungiert (Schreibweise: $A^\dagger$), wenn gilt:

$$\langle A^\dagger \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{b} \rangle = \langle \underset{\sim}{a}, A \underset{\sim}{b} \rangle \qquad \forall \ \underset{\sim}{a}, \underset{\sim}{b} \in \mathbb{C}^N.$$

Geben Sie die Elemente der Matrix von $A^\dagger$ an. Ist $A^\dagger$ eindeutig bestimmt ?

c) Ein Endomorphismus A von $\mathbb{C}^N$ heißt *hermitisch* oder *selbstadjungiert*, wenn $A^\dagger = A$ gilt. Es seien A und B hermitische Operatoren. Welche der folgenden Operatoren sind wiederum hermitisch:

- $\lambda A \quad$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$,
- AB,
- $[A, B] := AB - BA$,
- $\hat{\imath}[A, B]$?

Aufgabe 9.6 (D:18): Kommutatoren

Die „Multiplikation", d.h. Nacheinanderschaltung zweier quantenmechanischer Operatoren zu Messgrößen A, B ist im Allgemeinen nicht kommutativ, d.h. die Reihenfolge der Anwendung auf eine Wellenfunktion ist nicht gleichgültig. Ein Maß für diese „Nichtvertauschbarkeit" ist der *Kommutator*

$$[A, B] := AB - BA.$$

(Der Sachverhalt ist analog zur Nichtkommutativität der Matrixmultiplikation in der linearen Algebra.)

a) Der *fundamentale* oder *kanonische Kommutator* ist der Kommutator $[X_k, P_l]$ für die Operatoren der Orts- und Impulskomponenten. Berechnen Sie diesen Kommutator sowohl in der Orts- als auch in der Impulsdarstellung.
Hinweis: Es ist zweckmäßig, zuerst $[X_k, P_l]\psi(\vec{x}, t)$ (Ortsdarstellung) bzw. $[X_k, P_l]\varphi(\vec{p}, t)$ (Impulsdarstellung) für beliebige Wellenfunktionen zu berechnen. Durch Schreiben des Endresultates als Operatorwirkung $A\psi(\vec{x}, t)$ bzw. $A'\varphi(\vec{p}, t)$ und Weglassen der beliebigen Wellenfunktion ergibt sich die gewünschte Operatorrelation.

b) Beweisen Sie die Operatoridentität

$$[AB, C] = [A, C]B + A[B, C].$$

c) Berechnen Sie aus dem in a) errechneten fundamentalen Kommutator mit dem Resultat von b) die folgenden Kommutatoren:

$$[\vec{P}^2, X_k] \qquad\qquad [L_k, P_l],$$

wobei $L_k = \varepsilon_{ijk} X_i P_j$ (Summenkonvention!) der Operator des Bahndrehimpulses ist.