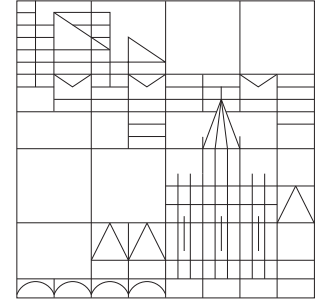




Theoretische Festkörperphysik Wintersemester 2010 - Übungsblatt 8

Ausgabe: 10.12.2010, Abgabe: 17.12.2010, Übung: 20.-22.12.2010

Aufgabe 26: Kronig-Penney-Modell

(7 Punkte)

Die allgemeine Form der Eigenfunktion eines (eindimensionalen) periodischen Potentials ist gemäß dem Bloch-Theorem $\psi(x) = u_k(x)e^{ikx}$, wobei $u(x) = u(x+a)$. Betrachten Sie das eindimensionale periodische Potential

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} k_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$$

mit der bekannten Deltafunktion $\delta(x)$ und $k_0 > 0$. Im Intervall $x \in (0, a)$ ist das Elektron frei und die Lösung, für eine feste Energie, die ebene Welle

$$\psi(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$$

mit $q = \sqrt{2mE}/\hbar$.

a) Stetigkeit der Wellenfunktion

Finden Sie mit Hilfe der Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = na$ eine Bedingung für die Koeffizienten der Funktion $u_k(x)$.

Hinweis: Die Stetigkeitsbedingung ist erfüllt für $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (u_k(\epsilon) - u_k(-\epsilon)) = 0$. Benutzen Sie, dass $u_k(x)$ periodisch ist (s.o.).

b) Schrödinger-Gleichung

Eine zweite Bedingung für die Koeffizienten A und B ergibt sich dadurch, dass die Wellenfunktion $\psi(x)$ die Schrödingergleichung an den Gitterpunkten erfüllen muß.

Hinweise: Integrieren Sie die Schrödinger-Gleichung von $x \in [-\epsilon, \epsilon]$ für $\epsilon \rightarrow 0$. Es gilt:

$$\psi'(x)|_{-\epsilon} = e^{-ika} \psi'(x)|_{a-\epsilon}.$$

c) Bandstruktur

Mit dem Ergebnis aus b) zeigen Sie, dass k und q folgende Beziehung erfüllen

$$\cos ka = \cos qa + \frac{k_0 a \sin qa}{2 qa}.$$

Lösen Sie die Gleichung z.B. graphisch und finden Sie die Bandstruktur dieses Kristalls.

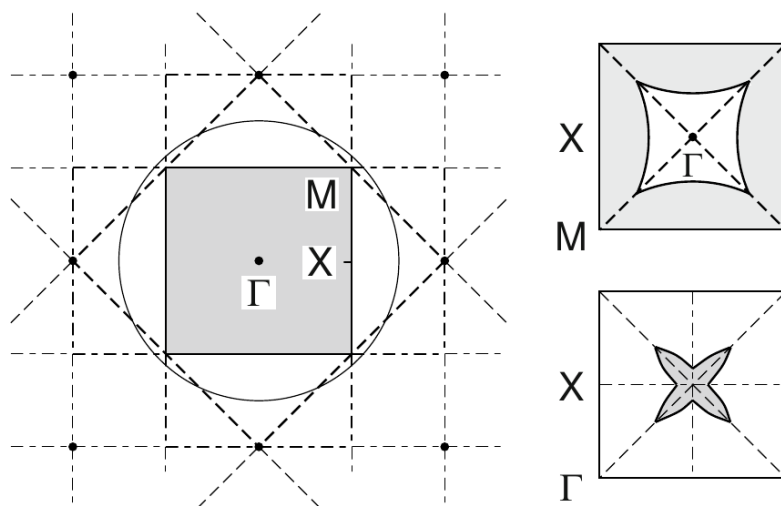


Abbildung 1: Brillouin-Zonen des zweidimensionalen Quadrat-Gitters und Fermi-Flächen.

Aufgabe 27: Freie Elektronen in einem Quadrat-Gitter

(6 Punkte)

a) Energie-Dispersion freier Elektronen

Berechnen und zeichnen Sie die Energie-Dispersion freier Elektronen für das Quadrat-Gitter entlang der Linien $\Gamma \rightarrow M$, $M \rightarrow X$ und $X \rightarrow \Gamma$ (siehe Abbildung) für die 3 niedrigsten Bänder (Die reziproken Gittervektoren können als Bandindex benutzt werden).

Hinweise: Die primitiven reziproken Gittervektoren sind

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Schreiben Sie die Energien der freien Elektronen als

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2.$$

Entlang der Linie $A-B$ parametrisieren Sie $\mathbf{k}$ mit $\alpha \in [0, 1]$ als

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_A + \alpha(\mathbf{k}_B - \mathbf{k}_A)$$

und skizzieren Sie die Energie-Dispersion.

b) Fermi-Energie

Kennzeichnen Sie die Position der Fermi-Energie wenn jedes Atom in der Einheitszelle ein, zwei oder drei Elektronen zur Verfügung stellt. Berechnen Sie die Dispersion für die zwei niedrigsten Bänder in Anwesenheit eines periodischen Potentials und diskutieren Sie Abweichungen des Fermi-Kreises mit dem Radius $k_F = \pi/a^2$ durch dieses Potential.

Hinweise: Für die Anzahl $\nu = 1, 2, 3$ der Elektronen pro Atom, ist die Flächendichte $n_s = \nu/a^2$ bei einem Atom pro Einheitszelle. Die Energie-Dispersion freier Elektronen ist an der Brillouin-Zonengrenze entartet. Heben Sie die Entartung durch Diagonalisierung der folgenden Matrix auf:

$$\begin{pmatrix} E(k) & V(\frac{2\pi}{a}) \\ V(\frac{2\pi}{a}) & E(k - \frac{2\pi}{a}) \end{pmatrix}.$$