Technische Universität Berlin
Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. Eckehard Schöll, PhD.
Dr. Frank Elsholz

Ausgabe: 16. Mai 2006
SS 2006

5. Übungsblatt

Theoretische Festkörperphysik I

Aufgabe 11 Kronig-Penney *Modell* (8 Punkte)

Betrachten Sie ein Elektron in einem periodischen Potential (eindimensional)

$$V(x) \;=\; \begin{cases} 0 & \text{für} \quad 0 \le x < a \\ V_0 & \text{für} \quad a \le x < d \end{cases}$$

und d-periodisch fortgesetzt.

Gesucht sind die Energieeigenfunktionen und Eigenwerte der zeitunabhängigen Schrödingergleichung. Als Ansatz im stückweise konstanten Potential dienen die allgemeinen Lösungen

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A\exp(i\lambda x) + B\exp(-i\lambda x) \qquad (0 \le x < a) \\ \psi_{II}(x) &= C\exp(i\mu x) + D\exp(-i\mu x) \qquad (a \le x < d) \\ &\vdots \end{aligned}$$

mit Wellenzahlen

$$\lambda = \tfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \mu = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

a) Berechnen Sie den Zusammenhang zwischen (A,B) und (C,D) unter Ausnutzung der Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktion und ihrer ersten Ableitung an der Grenze $x = a$ zwischen Bereich I und Bereich II als Matrixgleichung.
b) Nutzen Sie die Blochbedingung mit Blochwellenvektor k für den Zusammenhang zwischen $\psi_I(0)$ und $\psi_{II}(d)$, sowie zwischen $\psi'_I(0)$ und $\psi'_{II}(d)$ aus und leiten Sie die Bedingung zwischen k, λ und μ, dass ausgedehnte Lösungen existieren können, ab.
c) Lösen Sie die Bedingung aus b) grafisch für $V_0 = 240$ meV, $a = 6.5$ nm und $d = 9$ nm für ein effektives Elektron mit effektiver Masse $m = m^* = 0.067 m_e$. Wo liegen verbotene Bereiche (Lücken), wo erlaubt die Bedingung Lösungen (Energiebänder)?

Aufgabe 12 *Quasi-freie Elektronen* (6 Punkte)
Gegeben sei ein eindimensionales Gitter aus Ionenrümpfen mit dem Abstand a und dem effektiven Potential $V(x) = 2V_1 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$. Untersuchen Sie die Aufhebung der Entartung zwischen dem ersten und zweiten Band am Zonenrand $k \approx \pi/a$. Benutzen Sie im folgenden $\delta k \equiv k - \frac{\pi}{a}$.

a) Leiten Sie unter Annahme eines schwachen Potentials ($|V_1| \ll \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$) die Energie-Blochvektor-Beziehung für kleine δk ab.
b) Berechnen Sie die Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{dE(k)}{dk}$.
c) Berechnen Sie die effektive Masse bei $\delta k = 0$ für beide Bänder.
d) Geben Sie die Blochfunktionen $\psi_k(x)$ für beide Bänder an.
e) Berechnen Sie aus den Blochfunktionen den Impulsmittelwert in linearer Näherung von δk und vergleichen Sie mit den Ergebnissen aus b) und c).
f) Skizzieren Sie für $\delta k = 0$ das Potential und die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten der beiden Blochfunktionen als Funktion des Ortes.

Abgabe: 26. Mai 2006

WWW-Seite: http://wwwitp.physik.tu-berlin.de/lehre/TFP/

Scheinkriterien: Einmal Vorrechnen in den Übungen und eine erfolgreiche Rücksprache. *und* 60 % der erreichbaren Punkte in den Übungsaufgaben (Abgabe in Dreiergruppen!)

Sprechstunden: Schöll: Mi 14:30 - 15:30 Uhr PN 735, Elsholz: Di. 14 - 15 Uhr PN 629