Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik 5. Mai 2011

Prof. Dr. Eckehard Schöll, Dr. Kathy Lüdge
Dr. Carsten Weber

4. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 16.05.2011 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 9 (3 Punkte): *Dulong-Petitsches Gesetz*

Zeigen Sie, dass man für einen klassischen harmonischen Oszillator die mittlere Energie $k_{\mathrm{B}}T$ erhält, und leiten Sie daraus das Dulong-Petitsche Gesetz für die spezifische Wärme her.

Aufgabe 10 (7 Punkte): *Zustandsdichte*

(a) Für (dreidimensionale) Phononen ergibt sich für die Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{q})$ folgende Zustandsdichte $z(\omega)$ (vgl. VL):

$$z(\omega)d\omega = \left(\frac{V_{\mathrm{g}}}{(2\pi)^3} \int_{\omega(\mathbf{q})=\omega} \frac{df_\omega}{|\nabla_{\mathbf{q}}\omega(\mathbf{q})|} \right) d\omega.$$

Dabei ist df_ω das Flächenelement auf $\omega(\mathbf{q}) = \omega =$ const im $\mathbf{q}$-Raum. Berechnen Sie $z(\omega)$ für akustische Phononen, für welche in einem isotropen Kristall für kleine $|\mathbf{q}|$ gilt: $\omega_{\mathrm{L/T}} = v_{\mathrm{L/T}}|\mathbf{q}|$ ($v_{\mathrm{L/T}}$: longitudinale bzw. transversale Schallgeschwindigkeit).

(b) Leiten Sie nun analog die *elektronische* Zustandsdichte $z(\omega)$ für die dreidimensionale Dispersionsrelation $E(\mathbf{k})$ her:

$$z(E)dE = \left(2\frac{V_{\mathrm{g}}}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=E} \frac{df_E}{|\nabla_{\mathbf{k}}E(\mathbf{k})|} \right) dE.$$

Berechnen Sie die Zustandsdichte für ein isotropes, parabolisches Band $E(\mathbf{k}) = (\hbar^2/2m)\sum_{i=1}^d k_i^2$ für die Dimensionen $d = 1, 2, 3$. Benutzen Sie für $d = 1{,}2$ analoge Ausdrücke zu obiger Gleichung.

Aufgabe 11 (10 Punkte): *Kronig-Penney Modell*

Betrachten Sie ein Elektron in einem periodischen (eindimensionalen) Potential

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

($V_0 > 0$) und d-periodisch fortgesetzt, d.h. $V(x + d) = V(x)$.

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

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

mit Wellenzahlen

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

(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 $\psi_{\mathrm{I}}(0)$ und $\psi_{\mathrm{II}}(d)$ sowie zwischen $\psi'_{\mathrm{I}}(0)$ und $\psi'_{\mathrm{II}}(d)$ 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 $m = m^* = 0.067 m_{\mathrm{e}}$. Wo liegen verbotene Bereiche (Lücken), wo erlaubt die Bedingung Lösungen (Energiebänder)?