Korrektur/zusätzliche Erläuterungen zum Tutorium Übungsblatt 4

Die Besprechung der Aufgabe 11 (Kronig-Penney-Modell) des Übungsblatts 4 war etwas verwirrend und enthielt auch Fehler. Daher hier die Korrektur und weitere Erläuterungen:

Ziel ist nach wie vor, Eigenlösungen des periodischen Gitters zu finden. Es gibt dazu allerdings verschiedene Möglichkeiten (entweder über die Eigenwerte der Transfermatrix oder die Lösung der Blochbedingung bzw. der Randbedingungen). Die Formulierung der Übungsaufgabe ist eher für Zweites ausgelegt (obwohl beide Varianten funktionieren).

Teil (a) bleibt wie gehabt: Man braucht die Randbedingungen, um die Wellenfunktionen in den Bereichen I und II in Verbindung zu bringen.

Teil (b): Desweiteren können wir die Blochbedingung annehmen *für periodische Lösungen des Systems*, also für Lösungen mit Wellenzahl $k \neq \lambda, \mu$, welche in einer noch unbekannten Weise von der Energie E abhängt:

$$\psi(0) = e^{-ikd}\psi(d).$$

Das ergibt zwei weitere Gleichungen, *wobei $\psi(0)$ bzw. $\psi'(0)$ nur mit $\psi(d)$ bzw. $\psi'(d)$ in Relation steht.* Es ist natürlich falsch, wie im Tutorium behauptet, die Blochbedingung für jedes einzelne Intervall, also $[0, a)$ und $[a, d)$, für die jeweiligen Wellenvektoren anzusetzen.
Mit den Randbegingungen aus Teil (a) ergibt sich somit ein 4x4 Gleichungssystem für die Koeffizienten A, B, C, D. Lösungen des Systems gibt es nur, falls die Determinante der Matrix verschwindet, welches auf folgende Bedingung führt:

$$\cos(kd) = \cos(\lambda a)\cos(\mu b) - \frac{\lambda^2 + \mu^2}{2\lambda\mu}\sin(\lambda a)\sin(\mu b).$$

Alternativ kann man die Randbedingungen aus (a) ausnutzen, um die Blochbedingungen direkt auf eine 2x2 Matrix zu reduzieren.

Es würde sich wahrscheinlich auch anbieten, die Randbedingungen bei $x = 0$ auszuwerten, der Einfachheit halber. Habe ich nicht nachgerechnet, sollte aber insgesamt einfacher sein.