Übung 3 für Theoretische Festkörperphysik im WS 2012

Yahya Öz (yahya_oez@msn.com G.11.07)
Abgabe: 31.10.2012 Besprechung: 02.11.2012

1. **Kronig-Penney-Modell (14 Punkte)**
Das Kronig-Penney-Modell ist ein einfaches, eindimensionales Modell für das Verständnis der Bandstruktur in Festkörpern. Betrachte ein Elektron der Masse m, das sich im periodischen Potential

$$V(x) = aV_0 \sum_{m\in\mathbb{Z}} \delta(x - na)$$

bewegt. $V_0 > 0$ ist hier die Stärke des Potentials und a die Gitterkonstante.

   (a) Führe dimensionslose Einheiten ein, sodass die stationäre Schrödingergleichung die Form

   $$\mathbf{H}\varphi(y) = \left(-\partial_y^2 + 2c\sum_{n\in\mathbb{Z}} \delta(y-n)\right)\varphi(y) = q^2\varphi(y)$$

   annimmt. Welcher Zusammenhang existiert zwischen x und y, V_0 und c, sowie q^2 und E?

   (b) Erkläre durch Symmetrieargumente, weshalb die Gleichung $\varphi(1^+) = \varphi(1^-)$ erfüllt sein muss. Zeige, dass auch die Gleichung $\varphi'(1^+) - \varphi(1^-) = 2c\varphi(1)$ gilt.

   (c) Wegen der Periodizität des Potentials kommutiert $\mathbf{H}$ mit dem Translationsoperator, der durch

   $$\mathbf{T}\varphi(y) = \varphi(y-1)$$

   definiert ist. Folglich haben $\mathbf{H}$ und $\mathbf{T}$ ein gemeinsames System von Eigenfunktionen. Die Eigenwertgleichungen lauten:

   $$\mathbf{H}\varphi(y) = q^2\varphi(y) \quad (1)$$
   $$\mathbf{T}\varphi(y) = e^{-ik}\varphi(y) \quad (2)$$

   Bestimme die Lösungen von (1) und (2) als eine Funktion von k und q.Welche Gleichung stellt einen Zusammenhang zwischen k und q fest?

   (d) Begründe, warum k reell sein muss, damit $\varphi(y)$ ein gebundener, normierbarer Zustand ist. Kann q komplex werden? Diskutiere die Dispersionsrelation aus (c) graphisch.

2. **Eindimensionale Potentiale (6 Punkte)**
Die Fourierkoeffizienten $\psi_{\vec{k}-\vec{G}}$ der Energieeigenfunktionen $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \psi_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\vec{r}}$ sind durch das Gitterpotential $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\vec{r}}$ aufgrund der Schrödingergleichung im Fourierraum verknüpft. Folgende Gleichung kennen Sie aus der Vorlesung:

$$\left(\frac{\hbar^2\left(\vec{k}-\vec{G}\right)^2}{2m} - E\right)\psi_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}'} V_{\vec{G}'-\vec{G}}\psi_{\vec{k}-\vec{G}'} = 0$$

Im Folgenden betrachten wir eindimensionale periodische Gitter mit der Gitterkonstanten a.

   (a) Bestimme die Energiebänder für $V_{\vec{G}} \to 0$. Zeichne die Bandstruktur in der ersten Brillouin-Zone.

   (b) Für das periodische Potential $V(x) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ verschwinden nur zwei Koeffizienten V_G nicht. Berechne die Energiebänder in erster Ordnung Störungstheorie. Zeichne die Bandstruktur und vergleiche sie mit (a).