Serie 1: Kronig-Penney Modell

Abgabe: 26. Oktober, 2004

Wir untersuchen ein einfaches Modell eines 1D Kristalgitter, das von Kronig und Penney in 1931 eingeführt wurde. Die Atompotentiale sollen durch Rechteckpotentiale modeliert werden, wobei die Minima den Atomkernen entsprechen. Besonderes einfach lässt sich das Modell untersuchen im Limes, wenn die Potentialbarrieren durch Dirac'sche δ-funktionen ersetzt werden,

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - an). \tag{1}$$

Das ist das so genannte Kronig-Penney Potential, in Abb. 1A gezeigt.

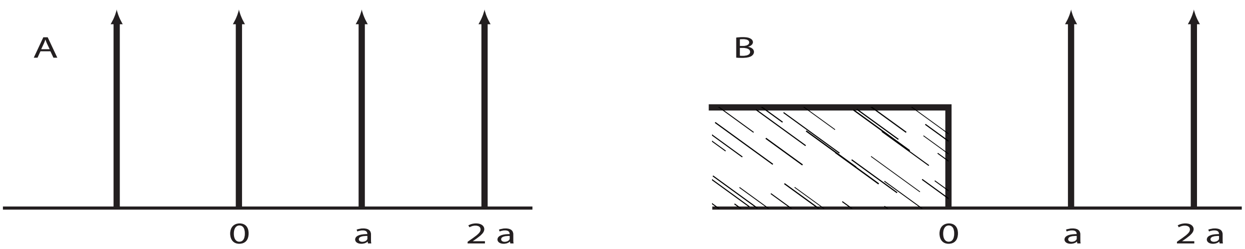

Abbildung 1: (A) Kronig-Penney Potential, $V(x)$. (B) Oberflächenpotential, $U(x)$.

Aufgabe 1.1 Energiebänder

Zeige, dass die Energien im Kronig-Penney Potential, durch die Gleichung,

$$\cos ka = \frac{v}{\beta a} \sin \beta a + \cos \beta a, \tag{2}$$

zu bestimmen sind, wobei $\beta = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ und $v = \frac{mV_0 a}{\hbar^2}$.

Die obige Gleichung lässt sich im Allgemeinen nur graphisch oder sogar numerisch lösen. Zeige, dass die enstehende Bandstruktur Energielücken (die Energieintervallen, wo es keine Lösung der Gleichung (2) möglich ist) hat.

Diskutiere vornehmlich die Fälle $v \to 0$ and $v \to \infty$

Hinweis: Nütze den Bloch'schen Ausdruck für die Wellenfunktion in einem periodischen Potential,

$$\psi(x + a) = \psi(x) e^{ika}. \tag{3}$$

Finde erst die Lösung der Schrödingergleichung in einer Elementarzelle und verwende dann die Bedingungen für Stetigkeit der Wellenfunktion am Zellenrand.

Aufgabe 1.2 Störungstheorie

Betrachte nun den Fall des infinitesimalen Potential v. Löse, iterativ oder anders, die Gleichung (2) und finde die ersten zwei Terme der v/E_0 Entwicklung der Energie (E_0 = Energie bei $v = 0$).

Berechne die Energiekorrekturen in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie. Gehe davon aus, dass bei $v = 0$ die Wellenfunktionen ebene Wellen sind. Beachte, dass man für $k = \frac{n\pi}{a}$ die entartete Störungstheorie benutzen soll.

Die Energiekorrektur zweiter Ordnung lässt sich mit Hilfe der Digammafunktion,

$$\psi_0(z+1) = -\gamma + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z}{n(n+z)}, \tag{4}$$

wobei $\gamma \simeq 0.577$, die so genannte *Euler-Mascheroni* Konstante ist, schreiben.

Vergleiche die Resultate.

Aufgabe 1.3 Zustandsdichte

Die Zustandsdichte $\rho(E)$ beschreibt die Nummer der Zustände mit Energien zwischen E und $E + dE$. Finde die Zustandsdichte, die dem Kronig-Penney'schen Potential entspricht.

Hinweis: Beachte, dass sich die Zustände durch k numerieren lassen. Die Zustandsdichte, als die Funktion von k betrachtet, ist eine Konstante ($= L/2\pi$). Eine kurze Überlegung ergibt,

$$\frac{L}{2\pi} dk = \rho(E(k))dE, \tag{5}$$

oder,

$$\rho(E) = \frac{L}{2\pi}\frac{dk}{dE}. \tag{6}$$

Die Ableitung dk/dE ist aus der Gleichung 2 zu berechnen.

Aufgabe 1.4 Oberflächenzustände

Betrachte nun das Potential,

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & x \leq 0, \\ V_0 \sum_{n=1}^{\infty} \delta(x - na) & x > 0, \end{cases} \tag{7}$$

auch in der Abb. 1B gezeigt.

Zeige, dass, für $E < U_0 < \infty$, in jeder Bandlücke genau ein zusätzliche Züstand entstehet der rechts und links von $x = 0$ exponentiel abfällt.

Hinweis: Führe den Ansatz,

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{\kappa x} & x < 0, \\ u(x)e^{-\mu x} & x \geq 0. \end{cases}, \tag{8}$$

für die Wellenfunktion ein, wobei $u(x+a) = u(x)$ erfüllt. Beachte, dass $\psi(x+a) = e^{-\mu x}\psi(x)$, für $x > 0$, sodass die Betrachtung von Aufgabe 1.1 einfach übernommen werden kann, indem man k durch $i\mu$ ersetzt. Es folgt sofort, dass μ,

$$\cosh \mu a = |v\frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a|, \tag{9}$$

erfüllt. Beachte, dass die Energie der eventuellen Lösung wirklich in die Bandlücke fällt.

Schreibe die Gleichung, die die Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = 0$ bestimmt, und zeige, dass die Energie des Oberflächenzustand durch,

$$\beta a \cot \beta a = \frac{Q^2}{2v} - \sqrt{Q^2 - (\beta a)^2}, \tag{10}$$

wobei $Q^2 = 2mU_0/\hbar^2$, gegeben ist.