

## Übungsblatt 1 - Präsenzübung

### 1. Aufgabe: Kronig-Penney-Modell

Das Kronig-Penney-Modell aus dem Jahr 1931 ist ein relativ einfach lösbares Problem für ein Elektron in einem (eindimensionalen) periodischen Potential, wie es in einem Kristall vorliegt (Quelle: R. de Kronig and W. G. Penney, Proc. R. Soc. London A 130, 499 (1931)). Da hierzu die Schrödinger-Gleichung gelöst wird, wird einerseits die Verknüpfung zur Quantenmechanik aus Semester 4 hergestellt. Aus der Lösung gewinnt man andererseits einen ersten Einblick in Bandstrukturen, was sich als sehr nützlich im weiteren Verlauf der Vorlesung erweisen wird.

Ein Kristall besteht aus einer räumlich periodischen Anordnung von Atomen. Die atomaren Potentiale, in denen sich ein einzelnes Elektron bewegt, werden dabei rechteckförmig angenommen, wobei die Minima den Positionen der Atomrümpfe entsprechen. Am einfachsten zu behandeln ist das Modell, in dem die rechteckförmigen Potentiale durch Delta-Funktionen genähert werden:

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - n \cdot a). \quad (1)$$

Dabei ist  $a$  die Gitterkonstante des Kristalls. Das ist das Kronig-Penney-Potential, siehe Abbildung 1.



### Energiebänder

Zeigen Sie unter Verwendung des so genannten Bloch-Ansatzes für eine Wellenfunktion in einem periodischen Potential

$$\varphi(x + a) = \varphi(x) \cdot e^{iKa},$$

dass die Energieeigenwerte im Kronig-Penney-Potential für eine bestimmte Wellenzahl  $k$  der folgenden Gleichung genügen:

$$\cos Ka = \frac{v}{2k} \sin ka + \cos ka. \quad (2)$$

Dabei ist:  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  und  $v = 2mV_0/\hbar^2$ .

Diese Gleichung kann im Allgemeinen nur graphisch oder numerisch gelöst werden. Zeigen Sie, dass die resultierende Bandstruktur Bandlücken, d.h. Bereiche, in denen keine Lösung der vorstehenden Gleichung existiert, aufweist! Diskutieren Sie in dem Zusammenhang insbesondere die Spezialfälle  $v \rightarrow 0$  und  $v \rightarrow \infty$ .

Hinweise zur Lösung:

- (1) Bestimmen Sie eine Lösung der Schrödingergleichung in einem endlichen Intervall  $[na, na+a]!$
- (2) Benutzen Sie dann die Forderung der Stetigkeit der Wellenfunktion an jedem Raumpunkt als Randbedingung!
- (3) Integrieren Sie zudem die Schrödingergleichung über das Intervall  $[na-\varepsilon, na+\varepsilon]$ . Der Grenzfall  $\varepsilon \rightarrow 0$  liefert eine weitere Randbedingung.

### Zustandsdichte

In der Festkörperphysik interessiert man sich wegen der Vielzahl der möglichen Realisierungen eines Energieeigenwerts oft nicht für die konkrete Realisierung, sondern nur dafür, wie viele Zustände bei einer bestimmten Energie vorliegen. Dies wird erfasst über die sogenannte Zustandsdichte, die konkret angibt, wie viele Zustände  $dn$  in einem Energieintervall  $dE$  liegen:  $dn/dE$ .

Berechnen Sie die Zustandsdichte im Kronig-Penney-Modell. Wie verhält sich die Zustandsdichte an den Grenzen der Bänder?

Hinweis hierzu:

Die Anzahl der Zustände pro Kristalleinheitszelle, also pro Intervall  $a$ , im Energiebereich zwischen  $(E, E+dE)$  ist gegeben durch

$$\rho(E)dE = \frac{dn}{dE} dE = \frac{dn}{dk} \frac{dk}{dE} dE.$$

Nehmen Sie dazu ein Kronig-Penney-Potential endlicher Länge  $Na$  mit periodischen Randbedingungen an ( $N$  ist dabei die Anzahl der Einheitszellen), so dass die Zustände durch wohl definierte  $k$ -Werte indiziert werden können. Zeigen Sie dann, dass

$$\rho(E) = \frac{a}{\pi} \left| \frac{dk}{dE} \right|.$$

Die Ableitung  $dk/dE$  kann aus der obigen transzendenten Gleichung (2) ermittelt werden.