

ÜBUNGSAUFGABEN (X)

(Abgabe zusammen mit Blatt IX bis Dienstag, 14.1.2014)

Bitte beachten: Wohl aufgrund der Weihnachtferien haben viele Studierende das Übungsblatt IX gar nicht oder nur teilweise bearbeitet. Daher wird der Abgabetermin für das Übungsblatt IX (oder Ergänzungen) bis zum 14.1. verlängert. Im aktuellen Übungsblatt X werden nur Bonuspunkte vergeben.

Aufgabe 1: (8 Bonuspunkte)

In der Vorlesung wurde im Rahmen des Tight-Binding-Modells eine genäherte Lösung für die Wellenfunktionen von Elektronen in einem periodischen Potential auf der Basis der LCAO-Methode diskutiert, die zu Energiebändern und -lücken der elektronischen Eigenzustände führte. Für einfache Potentiale ist mit einem geeigneten Ansatz für die Wellenfunktion unter Berücksichtigung des Blochschen Theorems aber auch eine exakte Lösung möglich. Im Falle eines eindimensionalen periodischen Rechteckpotentials werden dazu als Nebenbedingungen die Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung an allen Orten des Potentials gefordert, was zu einem System gekoppelter Differentialgleichungen führt, das für nichttriviale Lösungen zu einer Bestimmungsgleichung für die Energien $E(k)$ führt (vgl. Kronig-Penney-Modell).¹

Leiten Sie auf analoge Weise die Bestimmungsgleichung für die Energien $E(k)$ eines Elektrons her, das an den Gitterpunkten ma auf unendlich hohe, aber auch unendlich dünne Potentialwände stößt, sich dazwischen aber frei bewegen kann. Das entsprechende eindimensionale gitterperiodische Potential hat die Gestalt

$$V(x) = V_0 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(x - ma), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

mit Gitterkonstante a und Potentialkonstante $V_0 > 0$. Diskutieren Sie das Resultat.

Hinweis: Beachten Sie, dass hier die Ableitung der Wellenfunktion nicht überall stetig ist, so dass die Bildung von links- und rechtsseitiger Ableitung erforderlich wird. Eine neue Nebenbedingung erhalten Sie durch Integration der Schrödingergleichung über das Intervall $-\epsilon \leq x \leq \epsilon$ mit $\epsilon \rightarrow 0$.

¹siehe z.B. Kittel, Festkörperphysik, Oldenbourg-Verlag