9 Blatt - Festkörperphysik 2 - Bandstruktur und Bandlücken im Streubild

Gegeben ist ein eindimensionales periodisches Potential

$$U(x) = U(x + na)$$

mit der nach rechts, bzw. links, laufenden Welle ψ_r bzw. ψ_l

$$\begin{aligned}
\psi_r(x) &= e^{iKx} + re^{-iKx}, \text{ für } x = -\frac{a}{2} \\
\psi_r(x) &= te^{iKx}, \text{ für } x = \frac{a}{2} \\
\psi_l(x) &= e^{-iKx} + re^{iKx}, \text{ für } x = \frac{a}{2} \\
\psi_l(x) &= te^{-iKx}, \text{ für } x = -\frac{a}{2}
\end{aligned}$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi = A\psi_l(x) + B\psi_r(x)$$

und deren 1. Ableitung

$$\begin{aligned}
\psi'(x) &= -iKAte^{-iKx} + iKB\left(e^{iKx} - re^{-iKx}\right), \text{ für } x = -\frac{a}{2} \\
\psi'(x) &= iKA\left(-e^{-iKx} + re^{iKx}\right) + iKBte^{iKx}, \text{ für } x = \frac{a}{2}
\end{aligned}$$

Unter Nutzung der Periodizität des Potentials, ergibt sich auf Grund des Bloch-Theorems der folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned}
\psi(x+a) &= e^{ika}\psi(x) \\
\psi'(x+a) &= e^{ika}\psi'(x)
\end{aligned}$$

9.1 (a)

Es ist zu zeigen, dass K und damit die Energie des Blochelektrons $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ mit dem Wellenvektor k über die Beziehung

$$\cos(ka) = \frac{t^2 - r^2}{2t}e^{iKa} + \frac{1}{2t}e^{-iKa}$$

verknüpft ist. Wir können die allgemeine Lösung in das Blochtheorem einsetzen und erhalten:

$$A\psi_l(x+a) + B\psi_r(x+a) = e^{ika}\left(A\psi_l(x) + B\psi_r(x)\right)$$

betrachten wir nun den Punkt $x = -\frac{a}{2}$, erhalten wir

$$A\psi_l\left(\frac{a}{2}\right)+B\psi_r\left(\frac{a}{2}\right)=e^{ika}\left(A\psi_l\left(-\frac{a}{2}\right)+B\psi_r\left(-\frac{a}{2}\right)\right)$$

Einsetzen der Definitionen für $\psi_{l,r}(x)$ für die Punkte $x=\pm\frac{a}{2}$ führt dann auf

$$A\left(e^{-iK\frac{a}{2}}+re^{iK\frac{a}{2}}\right)+B\left(te^{iK\frac{a}{2}}\right)=e^{ika}\left(Ate^{iK\frac{a}{2}}+B\left(e^{-iK\frac{a}{2}}+re^{iK\frac{a}{2}}\right)\right)$$

umschreiben liefert

$$\left(e^{-iK\frac{a}{2}}+\left(r-te^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}\right)A+\left(\left(t-re^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{ika}e^{-iK\frac{a}{2}}\right)B=0$$

Analog können wir dies für die 1. Ableitung des Bloch Theorems tun und erhalten ($x=-\frac{a}{2}$):

$$\begin{aligned}
\psi'(x+a) &= e^{ika}\psi'(x)\\
\psi'\left(\frac{a}{2}\right) &= e^{ika}\psi'\left(-\frac{a}{2}\right)\\
iKA\left(-e^{-iK\frac{a}{2}}+re^{iK\frac{a}{2}}\right)+iKBte^{iK\frac{a}{2}} &= e^{ika}\left[-iKAte^{iK\frac{a}{2}}+iKB\left(e^{-iK\frac{a}{2}}-re^{iK\frac{a}{2}}\right)\right]
\end{aligned}$$

umformen führt uns auf

$$\left(\left(r+te^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{-iK\frac{a}{2}}\right)A+\left(\left(t+re^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{ika}e^{-iK\frac{a}{2}}\right)B=0$$

Aus dem Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
\left(e^{-iK\frac{a}{2}}+\left(r-te^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}\right)A+\left(\left(t-re^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{ika}e^{-iK\frac{a}{2}}\right)B &= 0\\
\left(\left(r+te^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{-iK\frac{a}{2}}\right)A+\left(\left(t+re^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{ika}e^{-iK\frac{a}{2}}\right)B &= 0
\end{aligned}$$

können wir nun die zwei unbekannten A,B bestimmen, wenn die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwindet:

$$\det\begin{pmatrix} \left(e^{-iK\frac{a}{2}}+\left(r-te^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}\right) & \left(\left(t-re^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{ika}e^{-iK\frac{a}{2}}\right)\\ \left(\left(r+te^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{-iK\frac{a}{2}}\right) & \left(\left(t+re^{ika}\right)e^{iK\frac{a}{2}}-e^{ika}e^{-iK\frac{a}{2}}\right)\end{pmatrix}=0$$

(es macht Sinn an diesem Punkt Abkürzungen einzuführen um die Übersichtlichkeit zu erhalten. Wie im Tutorium vorgeschlagen $\alpha=e^{iK\frac{a}{2}},\beta=e^{ika},\gamma=e^{-iK\frac{a}{2}}$)

$$\det\begin{pmatrix} \gamma+(r-t\beta)\alpha & (t-r\beta)\alpha-\beta\gamma\\ (r+t\beta)\alpha-\gamma & (t+r\beta)\alpha-\beta\gamma\end{pmatrix}=0$$

Wir erhalten hieraus

$$\begin{aligned}
(\gamma+(r-t\beta)\alpha)((t+r\beta)\alpha-\beta\gamma)-((r+t\beta)\alpha-\gamma)((t-r\beta)\alpha-\beta\gamma) &= 0\\
(\gamma+r\alpha-t\beta\alpha)(t\alpha+r\beta\alpha-\beta\gamma)-(r\alpha+t\beta\alpha-\gamma)(t\alpha-r\beta\alpha-\beta\gamma) &= 0
\end{aligned}$$

Konzentrierte Rechnung führt uns auf

$$\begin{aligned}
0 &= \gamma t\alpha+r\alpha\beta\gamma-\beta\gamma^2+rt\alpha^2+r^2\alpha^2\beta-r\alpha\beta\gamma-t^2\alpha^2\beta-rt\alpha^2\beta^2+t\alpha\beta^2\gamma\\
&- \left(rt\alpha^2-r^2\alpha^2\beta-r\alpha\beta\gamma+t^2\alpha^2\beta-rt\alpha^2\beta^2-t\alpha\beta^2\gamma-\gamma t\alpha+r\alpha\beta\gamma+\beta\gamma^2\right)\\
&= 2\gamma t\alpha-2\beta\gamma^2+2r^2\alpha^2\beta-2t^2\alpha^2\beta+2t\alpha\beta^2\gamma
\end{aligned}$$

Umstellen liefert

$$\gamma t\alpha - \beta\gamma^2 + r^2\alpha^2\beta - t^2\alpha^2\beta + t\alpha\beta^2\gamma = 0$$

Da unsere Zielgleichung bekannt ist, können wir nun ergebnisgerecht umstellen, indem wir durch $t\alpha\beta\gamma$ dividieren:

$$\left(\frac{1}{\beta} + \beta\right) + \frac{\left(r^2 - t^2\right)\alpha}{t\gamma} - \frac{\gamma}{t\alpha} = 0$$

Setzen wir jetzt unsere Abkürzungen ein, erhalten wir

$$\left(e^{-ika} + e^{ika}\right) = \frac{\left(t^2 - r^2\right)}{t} e^{iKa} + \frac{1}{t} e^{-iKa}$$

dies entspricht dem gesuchten Ergebnis

$$\cos(ka) = \frac{\left(t^2 - r^2\right)}{2t} e^{iKa} + \frac{1}{2t} e^{-iKa}$$

□

9.2 (b)

Es ist zu zeigen, dass die Wronski Funktion

$$w(\phi_1, \phi_2) = \phi_1'\phi_2 - \phi_1\phi_2' = \frac{\partial\phi_1}{\partial x}\phi_2 - \phi_1\frac{\partial\phi_2}{\partial x}$$

unabhängig von x ist, d.h. $w'(x) = 0$. Hierzu müssen wir also nur die Wronski Funktion nach x ableiten

$$\frac{\partial w(\phi_1(x), \phi_2(x))}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial\phi_1}\frac{\partial\phi_1}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial\phi_2}\frac{\partial\phi_2}{\partial x}$$

wobei mit der Definition der Wronski Funktion folgt

$$\frac{\partial w(\phi_1(x), \phi_2(x))}{\partial x} = -\phi_2'\phi_1' + \phi_1'\phi_2' = 0$$

□

9.3 (c)

Zu zeigen

$$\left|t^2\right| + \left|r^2\right| = 1$$

Wir können hierzu die Wronski Funktion $w(\psi_l, \psi_l^*)$ für x um $-\frac{a}{2}$ und $\frac{a}{2}$ berechnen. In **b)** haben wir bereits gezeigt, dass die Wronski Funktion unabhängig von x ist. Somit ist also $w(\psi_l, \psi_l^*)$ für $x = \frac{a}{2}$ und $x = -\frac{a}{2}$ gleich und wir erhalten ($\alpha* = \gamma$, vice versa $\gamma* = \alpha$):

$$\begin{aligned}
\psi_l'\left(\frac{a}{2}\right)\psi_l*\left(\frac{a}{2}\right) - \psi_l\left(\frac{a}{2}\right)\psi_l*'\left(\frac{a}{2}\right) &= \psi_l'\left(-\frac{a}{2}\right)\psi_l*\left(-\frac{a}{2}\right) - \psi_l\left(-\frac{a}{2}\right)\psi_l*'\left(-\frac{a}{2}\right) \\
iK(-\gamma + r\alpha)(\alpha + r*\gamma) - (\gamma + r\alpha)(-iK(-\alpha + r*\gamma)) &= -iKt\alpha t*\gamma - t\alpha iKt*\gamma
\end{aligned}$$

Konzentriertes Rechnen liefert

$$\begin{aligned}
-\gamma\alpha + r\alpha^2 + \left|r^2\right|\alpha\gamma - r*\gamma^2 - \gamma\alpha + r^*\gamma^2 - r\alpha^2 + \left|r^2\right|\alpha\gamma &= -2\alpha\gamma\left|t^2\right| \\
\left|t^2\right| + \left|r^2\right| &= 1
\end{aligned}$$

□

9.4 (d)

Es ist jetzt $w(\psi_l, \psi_r*)$ zu berechnen und zu zeigen, dass $rt*$ rein imaginär ist, d.h. für $t = |t|\,e^{i\delta}$ folgt $r = \pm i\,|r|\,e^{i\delta}$. Wir gehen zu **c)** äquivalent vor und setzen ein

$$\begin{aligned}
\psi_l'\left(\frac{a}{2}\right)\psi_r*\left(\frac{a}{2}\right) - \psi_l\left(\frac{a}{2}\right)\psi_r*'\left(\frac{a}{2}\right) &= \psi_l'\left(-\frac{a}{2}\right)\psi_r*\left(-\frac{a}{2}\right) - \psi_l\left(-\frac{a}{2}\right)\psi_r*'\left(-\frac{a}{2}\right) \\
iK(-\gamma + r\alpha)\,t*\gamma + (\gamma + r\alpha)\,iKt*\gamma &= -iKt\alpha(\alpha + r*\gamma) + t\alpha iK(\alpha - r*\gamma) \\
2rt*\alpha\gamma &= -2r*t\alpha\gamma \\
rt* &= -r*t
\end{aligned}$$

Die Bedingung $rt* = -r*t$ ist äquivalent dazu, dass $rt*$ rein imaginär ist. Der Realteil von $rt*$ ist Null. Wir können jede komplexe Zahl durch $rt* = a + bi$ ausdrücken. In diesem Fall gilt

$$\begin{aligned}
rt^* &= -r^*t \\
rt^* &= -(r^*t)^* \\
a + bi &= -(a + bi)^* \\
a + bi &= -a + bi \\
a &= -a
\end{aligned}$$

dies ist nur erfüllt für $a = 0$, somit ist der Realteil von rt^* also Null und rt^* rein imaginär.

□

9.5 (e)

Unter Verwendung von $t = |t|\,e^{i\delta}$ und $r = \pm i\,|r|\,e^{i\delta}$ folgt also für

$$\cos(ka) = \frac{t^2 - r^2}{2t}e^{iKa} + \frac{1}{2t}e^{-iKa}$$

nach einsetzen

$$\begin{aligned}
\cos(ka) &= \frac{|t|^2 e^{2i\delta} + |r|^2 e^{2i\delta}}{2\,|t|\,e^{i\delta}}e^{iKa} + \frac{1}{2\,|t|\,e^{i\delta}}e^{-iKa} \\
\cos(ka) &= \frac{|t|^2 + |r|^2}{2\,|t|}e^{i(\delta + Ka)} + \frac{1}{2\,|t|}e^{-i(\delta + Ka)}
\end{aligned}$$

verwenden wir nun unser Ergebnis aus **c)** $|t|^2 + |r|^2 = 1$, erhalten wir

$$
\begin{aligned}
\cos(ka) &= \frac{1}{2|t|}\left(e^{i(\delta+Ka)} + e^{-i(\delta+Ka)}\right) \\
|t|\cos(ka) &= \cos(Ka+\delta)
\end{aligned}
$$

□

Die linke Seite kann Werte zwischen $-|t|$ und $|t|$ annehmen, wobei die rechte Seite Werte zwischen -1 und 1 besitzt. Es entstehen also (ähnlich zum Kronig-Penney-Modell) Bandlücken, da die Relation nicht für alle K-Werte erfüllt werden kann. Die Bandlücken werden um $Ka + \delta = n\pi$ auftreten, die die Extrema des Cosinus darstellt.

9.6 (f)

skipped