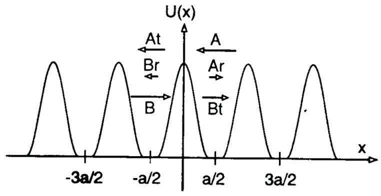
Festkörperphysik 2 - Blatt 9 / SS 2008 - Bandstruktur und Bandlücken im Streubild

Betrachtet werde ein eindimensionales periodisches Potential $U(x) = U(x+na)$. In einem kleinen Bereich um $x = (n + \frac{1}{2}a)$ sei das Potential konstant und die Wellenfunktion ist eine Linearkombination von ebenen Wellen $e^{\pm iKx}$ mit Energie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$.



Die bei $x = -a/2$ ($x = a/2$) nach rechts (links) laufende Welle Ψ_r (Ψ_l) wird durch das Potential zum Teil reflektiert (Reflexionskoeffizient r) und zum Teil transmittiert (Transmissionskoeffizient t).
$\Psi_r(x) = e^{iKx} + re^{-iKx}$, für $x = -a/2$ und $\Psi_r(x) = te^{iKx}$, für $x = a/2$
und analog:
$\Psi_l(x) = e^{-iKx} + re^{iKx}$, für $x = a/2$ und $\Psi_l(x) = te^{-iKx}$, für $x = -a/2$

Die allgemeine Lösung Ψ ist eine entsprechende Linearkombination: $\Psi = A\Psi_l(x) + B\Psi_r(x)$.

Auf Grund des Bloch-Theorems gibt es periodische Lösungen zum Wellenvektor k (nicht K !!!). Die stetige Differenzierbarkeit der Wellenfunktion fordert:
$\Psi(x+a) = e^{ikx}\Psi(x)$, sowie für die Ableitung $\Psi'(x+a) = e^{ikx}\Psi'(x)$. (*)

a) Zeigen Sie durch Lösen von (*) für $x = -a/2$, 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 sind (4 Punkte).

b) Φ_1 und Φ_2 seien Lösungen gleicher Energie zum Hamiltonoperator:
$-\frac{\hbar^2}{2m}\Phi_i + v(x)\Phi_i = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}\Phi_i, i = 1, 2,$

wobei $v(x)$ das Potential im Bereich $-a/2 \leq x \leq a/2$ sei. Zeigen Sie, daß die Wronski Funktion $w(\Phi_1, \Phi_2) = \Phi_1'\Phi_2 - \Phi_1\Phi_2'$ unabhängig von x ist, d.h. $w'(x) = 0$. (2 Punkte)

c) Zeigen Sie, daß $|t^2| + |r^2| = 1$ gilt, indem Sie $w(\Psi_l, \Psi_l^*)$ im konstanten Bereich des Potentials, d.h. für x um $-a/2$ und x um $a/2$ berechnen. (Bemerkung: v sei reell, d.h. Ψ und Ψ^* sind Lösungen zu gleichem $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$.) (2 Punkte)

d) Berechnen Sie $w(\Psi_l, \Psi_r^*)$ und zeigen Sie, daß rt^* rein imaginär ist, d.h. für $t = |t|e^{i\delta}$ folgt $r = \pm i|r|e^{i\delta}$. (2 Punkte)

e) Zeigen Sie, daß demzufolge gilt: $\cos(Ka + \delta) = |t| \cos\ ka$
und diskutieren Sie das Ergebnis. Zeigen Sie insbesondere, daß Bandlücken um $Ka + \delta = n\pi$ auftreten. (2 Punkte)

f) Zeigen Sie, daß für schwache Barierre ($|t| \approx 1, |r| \approx 0, \delta \approx 0$) die Breite der Bandlücke $E_{gap} = 2\pi n \frac{\hbar^2}{ma^2}|r|$ beträgt, während für hohe Barriere ($|t| \approx 0, |r| \approx 1$) die Bandbreiten von der Ordnung $|t|$, d.h. sehr schmal sind. (2 Punkte)