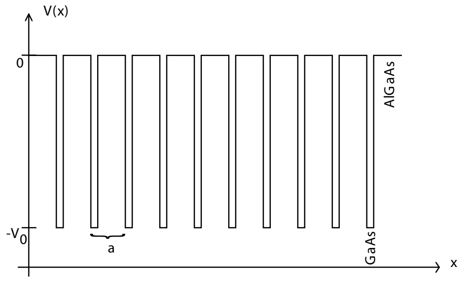
8. Übungsblatt

Verteilung 13. November 2007
Besprechung 21./22. November 2007

Elektronen in einem Festkörper: Bandstruktur

Mit einer MBE(molecular beam epitaxy)–Anlage ist es möglich, Kristalle Atomlage für Atomlage wachsen zu lassen. Im Prinzip handelt es sich um einen kontrollierten Aufdampfprozess unter Ultra-Hoch-Vakuum-Bedingungen ($p < 10^{-10}$ Torr), wobei die Atome in Monolagen auf ein Substrat abgeschieden werden. Mit dieser Methode gewinnt man heute Kristalle mit speziellen gewünschten Eigenschaften. So kann beispielsweise ein periodisches Potential hergestellt werden, indem man Materialien mit ähnlicher Gitterkonstante (z.B. GaAs und AlGaAs) aufeinander wachsen lässt (sog. Halbleiter-Heterostrukturen).



In dieser Übung soll die Quantenmechanik in periodischen Potentialen genauer untersucht werden, die von zentraler Bedeutung für das Verständnis der Festkörperphysik ist.

1. **Translationsoperator:** Untersuchen Sie zunächst allgemein ein periodisches, eindimensionales Potential mit $V(x+a) = V(x)$. Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

mit dem Translationsoperator $T(a)$ vertauscht. Dieser ist über die Eigenschaft $T(a)\psi(x) = \psi(x+a)$ definiert (Translationssymmetrie des Gitters). Leiten Sie den Translationsoperator $T(a)$ explizit her. *Hinweis:* Entwickeln Sie $\psi(x+a)$ “für kleine a” in eine Taylorreihe um x.

2. **Bloch-Theorem:** Alternativ zum Beweis aus der Vorlesung kann man das Bloch-Theorem auch mit dem Translationsoperator herleiten. Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen die Form

$$\psi_k(x) = e^{ikx}\phi_k(x)$$

haben, wobei $\phi_k(x+a) = \phi_k(x)$ gilt und k ein reeller “Wellenvektor” ist. *Hinweis:* Benutzen Sie die folgende Hilfsfunktion: $W(x) = \psi_{E_1}(x)\psi'_{E_2}(x) - \psi_{E_2}(x)\psi'_{E_1}(x)$, wobei $\psi_{E_i}(x)$ Eigenfunktionen zu den Energien $E_1 = E_2$ sind. Zeigen Sie, dass W(x) konstant und eine Eigenfunktion von T(a) ist.

3. *Zusatzaufgabe* – **Kronig-Penney-Modell der Energiebänder in Festkörpern:** Verwenden Sie nun das einfache Modellpotential

$$V(x) = -V_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x+na)$$

mit $V_0 > 0$, $n \in Z$.

Wie lautet die Bedingung für die Existenz reeller Eigenwerte? Bestimmen Sie so die erlaubten Energiebereiche im Potential. Skizzieren Sie die entsprechenden Energiebänder in Abhängigkeit von k. *Hinweis:* Benutzen Sie als Ansatz ebene Wellen zusammen mit dem Bloch-Theorem: $\psi_k(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x} = e^{ikx}\phi_k(x)$, wobei allgemein $\kappa \neq k$ gilt.

Verständnisfragen zum Bloch-Theorem

Die Aussagen des Bloch-Theorems über die Periodizität der Wellenfunktion und der Energieeigenwerte gelten für beliebige periodische Potentiale. Mit den folgenden Fragen sollen die Aussagen des Theorems besser untersucht werden.

1. Wie hängt die Periodizität der Wellenfunktion im k-Raum von der Amplitude des Potentials ab?

   A Gar nicht.

   B Für höhere Potentialamplituden wird die Periode grösser.

   C Für grosse Potentialamplituden ist die Wellenfunktion auf einen Gitterplatz beschränkt.

   D Für höhere Potentialamplituden wird die Periode kleiner.

---

2. Wie hängt die Periodizität der Wellenfunktion im k-Raum von der Form des Potentials ab?

   A Gar nicht.

   B Je steiler das Potential, desto kleiner die Periode.

   C Je flacher das Potential, desto kleiner die Periode.

   D Für ein senkrecht abfallendes Potential ist die Wellenfunktion auf einen Gitterplatz beschränkt.

---

3. Welche Eigenschaft des Potentials bestimmt die Grösse der zweituntersten Bandlücke für den Fall des quasi-freien Elektronengases?

   A Im quasi-freien Elektronengas gibt es nur eine Bandlücke.

   B Die zweitunterste Bandlücke ist bestimmt durch die erste Fourierkomponente des Potentials.

   C Die zweitunterste Bandlücke ist bestimmt durch die zweite Fourierkomponente des Potentials.

   D Die zweitunterste Bandlücke ist bestimmt durch die die Summe aller Fourierkomponenten des Potentials.