9. Übungsblatt

Verteilung 20. November 2007
Besprechung 28./29. November 2007

Elektronen in einem Festkörper: Bandstruktur (Teil 2)

Tight Binding Modell in einer Dimension

In dieser Übung soll mit einem einfachen eindimensionalen Modell nachvollzogen werden, wie aus lokalisierten Wellenfunktionen durch Überlapp eine Bandstruktur entstehen kann. Das Modellpotential aus periodischen Deltafunktionen ist dasselbe, welches auch beim Kronig-Penney-Modell (Übungsblatt 8, Aufgabe 3) betrachtet wurde. Im Gegensatz zum Ansatz mit ausgedehnten ebenen Wellen soll jetzt aber von lokalisierten Zuständen ausgegangen werden.
Um die Bandstruktur $E(k)$ des tiefsten Energiebandes zu bestimmen, gehen Sie wie folgt vor:

1. Bestimmen Sie zunächst den niedrigsten (und einzigen) gebundenen Eigenzustand E_0 und die dazugehörige Wellenfunktion (das "Atom-Orbital") $\phi_0(x)$ für ein einzelnes Deltapotential

$$U_0(x) = -u_0\delta(x).$$

2. Betrachten Sie nun den "eindimensionalen Kristall", dessen Potential gegeben ist durch

$$U(x) = U_0(x) + \Delta U(x) = U_0(x) - \sum_{n=1}^{\infty} u_0\left(\delta(x-na) + \delta(x+na)\right).$$

Im Sinne der Tight Binding Näherung nehmen Sie an, dass die ausgedehnte Wellenfunktionen für die Zustände im tiefsten Band gegeben sind durch die Linearkombinationen der Atom-Orbitale

$$\psi_k(x) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \phi_0(x-ja)e^{ikja}, \tag{1}$$

wobei k ein reeller "Wellenvektor" ist.
Zeigen Sie, dass die $\psi_k(x)$ das Bloch-Theorem erfüllen.

3. Setzen Sie den Ansatz (1) in die Schrödingergleichung des 1D-Kristalls ein und zeigen Sie durch Multiplikation mit $\phi_0(x)$ und anschliessende Integration über x, dass die Dispersionsrelation die Form

$$E(k) = E_0 + \frac{\beta + \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n \cos(nka)}{1 + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \cos(nka)}$$

annimmt. Geben Sie die Grössen α_n, β und γ_n explizit an. Vereinfachen Sie die Formel unter der Bedingung $\kappa a \gg 1$. Geben Sie den Ausdruck für die effektive Masse und vergleichen Sie diesen mit dem freien Elektron.