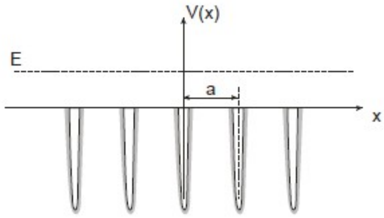
Nachtrag UE 12

4. **Periodisches δ-Potential und Bändermodell:** Ein Teilchen der **Masse** m und der **Energie** E, $E > 0$, befinde sich in Wechselwirkung mit einem **anziehenden periodischen δ-förmigen Potential** der Form $V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \cdot D \cdot \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta(x + l \cdot a)$, $D > 0$, mit der **Gitterkonstante** $a > 0$ (siehe Skizze).



Das **Blochtheorem**, welches für **periodische Potentiale** gilt, besagt, dass die Energieeigenfunktionen eines Teilchens durch einen **kontinuierlichen Parameter** K, $K \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$, die sogenannte **Quasiwellenzahl**, gekennzeichnet werden können. Für die zu einem gegebenen K gehörige Energieeigenfunktion gilt $\psi_K(x + l \cdot a) = e^{i \cdot K \cdot l \cdot a} \cdot \psi_K(x)$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.
Leiten Sie mit Hilfe der **Anschlussbedingung für die Ableitung** der Wellenfunktionen von links nach rechts eines δ-Potentiales **an der Stelle** a, $\left.\frac{d\psi_{links}(x)}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_{rechts}(x)}{dx}\right|_{x=a} + 2 \cdot D \cdot \psi(a)$ sowie mit Hilfe des Blochtheorems die **Eigenwertbedingung für die möglichen Energiewerte** E **des Teilchens her** und erläutern Sie, warum es zum Auftreten von "erlaubten" und "verbotenen" Energiebereichen, den sogenannten **Energiebändern**, kommt.

(<u>Lösung</u>: $\cos(K \cdot a) = \cos\left(\sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}} \cdot a\right) - \frac{D}{\sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}}} \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}} \cdot a\right)$*)*

Zunächst benötigen wir einen Ansatz für die Wellenfunktion. Wir lösen also die Schrödinger Gleichung für ein freies Teilchen $V(x) = 0$ für die Bereiche zwischen den Delta Peaks. Dies führt zu dem bekannten Ergebnis:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \dots & \\ \Psi_0(x) & \text{für: } 0 \leq x \leq a \\ \Psi_1(x) & \text{für: } a \leq x \leq 2a \\ \dots & \\ \Psi_l(x) & \text{für: } la \leq x \leq (l+1)a \\ \dots & \end{cases}, \tag{1}$$

$$\text{wobei} \qquad \Psi_l(x) = A_l \cdot e^{ikx} + B_l \cdot e^{-ikx} \qquad \text{mit} \qquad k = \frac{\sqrt{E2m}}{\hbar} \tag{2}$$

Mithilfe des Bloch Theorems[1]

$$\Psi_K(x + la) = e^{iKla} \cdot \Psi_K(x), \tag{3}$$

wollen wir nun die Koeffizienten A_l und B_l in Abhängigkeit von A_0 und B_0 ausdrücken. Dafür nehmen wir an $0 \leq x \leq a$. Auf der rechten Seite in (3) brauchen wir also Ψ_0. Außerdem gilt in diesem Fall $la \leq x + la \leq (l+1)a$ wir brauchen auf der linken Seite in (3) also Ψ_l:

$$A_l \cdot e^{ik(x+la)} + B_l \cdot e^{-ik(x+la)} = e^{iKla} \cdot A_0 \cdot e^{ikx} + B_0 \cdot e^{-ikx} \tag{4}$$

Daraus folgt:

$$A_l = A_0 \cdot e^{iKla} \cdot e^{-ikla} \tag{5}$$
$$B_l = B_0 \cdot e^{iKla} \cdot e^{ikla} \tag{6}$$

Wir wollen im Folgenden den Übergang an $x = a$ genauer betrachten. Es gilt:

$$\Psi_{0,K}(a) = \Psi_{1,K}(a) \tag{7}$$
$$\Rightarrow A_0 \cdot e^{ika} + B_0 \cdot e^{-ika} = (A_0 + B_0) \cdot e^{iKa} \tag{8}$$

und

$$\frac{\partial \Psi_{0,K}}{\partial x}(a) = \frac{\partial \Psi_{1,K}}{\partial x}(a) + 2D \cdot \Psi_K(a) \tag{9}$$
$$\Rightarrow A_0 \cdot e^{ika} - B_0 \cdot e^{-ika} = (A_0 - B_0) \cdot e^{iKa} + \frac{2D}{ik} \cdot (A_0 + B_0) \cdot e^{iKa}. \tag{10}$$

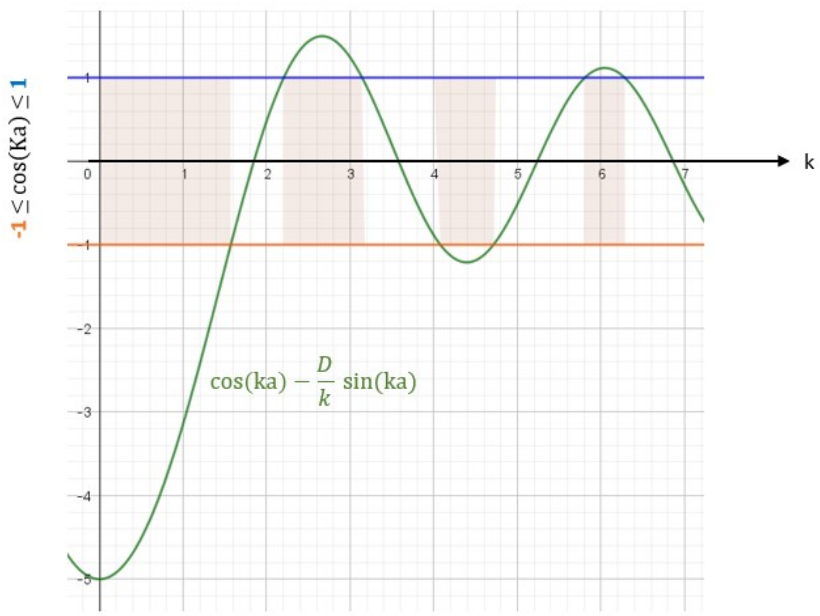
In Matrixschreibweise sieht das Gleichungssystem nun folgendermaßen aus:

$$\begin{pmatrix} e^{ika} - e^{iKa} & e^{-ika} - e^{iKa} \\ e^{ika} - e^{iKa} - \frac{2D}{ik} e^{iKa} & e^{iKa} - e^{-ika} - \frac{2D}{ik} e^{iKa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Aus der Bedingung, dass die Determinante dieser Matrix $= 0$ sein muss folgt mithilfe der Eulerschen Formeln:

$$\cos(Ka) = \cos(ka) - \frac{D}{k} \sin(ka). \tag{12}$$

Es gibt Bereiche in denen (12) ungültig ist (roter Bereich in der folgenden Abbildung), da die linke Seite von (12) mit ± 1 begrenzt ist, während sich auf der rechten Seite auch Werte außerhalb dieses Bereichs bilden lassen.



Um die Zonengrenzen zu ermitteln setzten wir die linke Seite von (12) also gleich ± 1:

$$\pm 1 = \cos(ka) - \frac{D}{k}\sin(ka) \tag{13}$$

$$\text{ist erfüllt für: } ka = \pi n \tag{14}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \tag{15}$$

[1] Die Herleitung des Bloch Theorems wird in Festkörperphysik I besprochen und basiert auf der Periodizität des Potentials.