Aufgabenblatt 08, Abgabe: 18. 01. 2011

Aufgabe 12. Elektronen im periodischen Deltapotential (20 Punkte)

Betrachten Sie ein Elektron (Masse m_0, Energie E) im periodischen eindimensionalen Deltapotential

$$V(x) = v_\mathrm{s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL) \quad ,$$

wobei die Amplitude v_s des Potentials zunächst einmal positiv oder negativ sein kann. Die Wellenfunktion hat bekanntlich in den Bereichen zwischen den Deltapeaks die Form:

$$\phi(x) = A_n e^{ik(x-nL)} + B_n e^{-ik(x-nL)} \qquad [-L < (x - nL) < 0 \;,\; n \in \mathbb{Z}] \quad , \tag{1}$$

wobei die Wellenzahl durch $k = \sqrt{2m_0 E/\hbar^2}$ gegeben ist.

(a) Bestimmen Sie die Matrix W, die die Koeffizienten in der Wellenfunktion auf beiden Seiten des Deltapeaks am Ort $x = nL$ miteinander verknüpft: $\binom{A_{n+1}}{B_{n+1}} = W\binom{A_n}{B_n}$. Überprüfen Sie, dass $\det(W) = 1$ gilt.

(b) Bestimmen Sie die Beziehung zwischen den Koeffizienten $\binom{A_n}{B_n}$ und $\binom{A_0}{B_0}$ und leiten Sie hieraus ab, dass stationäre Lösungen nur dann existieren, wenn die (i.A. komplexen) Eigenwerte der Matrix W betragsmäßig gleich Eins sind. Zeigen Sie, dass hieraus das allgemeine Kriterium $\frac{1}{2}|\mathrm{Sp}(W)| \leq 1$ folgt und dass dieses Kriterium im Falle des periodischen Deltapotentials konkret die folgende Form annimmt:

$$|\cos(kL) + \frac{1}{k\ell_\mathrm{s}} \sin(kL)| \leq 1 \quad ; \quad \ell_\mathrm{s} \equiv \frac{\hbar^2}{m_0 v_\mathrm{s}} \;.$$

(c) Betrachten Sie zunächst den Fall $v_\mathrm{s} > 0$ (d.h. $\ell_\mathrm{s} > 0$). Zeigen Sie, dass die möglichen k-Werte der *ausgedehnten* stationären Zustände ($E \geq 0$ bzw. $k \in \mathbb{R}$) in Energiebändern angeordnet sind; konstruieren Sie einige dieser Energiebänder mit Hilfe einer graphischen Darstellung. Gibt es für $v_\mathrm{s} > 0$ auch *gebundene* stationäre Zustände ($E < 0$ bzw. $k = i\kappa$ mit $\kappa \in \mathbb{R}$)? Bestimmen Sie die möglichen κ-Werte, falls dies so ist. Bestimmen Sie das Verhalten aller Energiebänder in Grenzfall $v_\mathrm{s} \to \infty$.

(d) Betrachten Sie nun den Fall $v_\mathrm{s} < 0$ (d.h. $\ell_\mathrm{s} = -|\ell_\mathrm{s}| < 0$). Bestimmen Sie, ob die möglichen k-Werte der ausgedehnten stationären Zustände auch in diesem Fall in Energiebändern angeordnet sind. Entscheiden Sie insbesondere, ob das untere ausgedehnte Band bis $k = 0$ reicht. Gibt es für $v_\mathrm{s} < 0$ gebundene stationäre Zustände? Bestimmen Sie die möglichen κ-Werte, falls dies so ist. Bestimmen Sie das Verhalten aller Energiebänder im Grenzfall $v_\mathrm{s} \to -\infty$.

(e) **Bonuspunkte:** Zeigen Sie, dass die Form (1) von $\phi(x)$ vollständig im Einklang mit dem Bloch-Theorem ist.