10. Übungsblatt zur Vorlesung Einführung in die Festkörperphysik

Ausgabe: Montag, 13.12.
Abgabe: bis Montag, 20.12., 08:15 im Moodle

WiSe 2021
Prof. Dr. D. Suter

---

1. Aufgabe: Ein einfaches Bändermodell (6 Punkte)

In dieser Aufgabe soll ein erster Einblick in die Energiestruktur von Elektronen in kristallinen Festkörpern gewonnen werden. Dazu wird die Schrödingergleichung für ein Potential

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

diskutiert, welches die mit dem Abstand a periodisch angeordneten Atompotentiale in einer Dimension modellieren soll.

a) Zunächst soll für dieses Potential die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

im Bereich $0 < x < a$ gelöst werden. Setzen Sie eine Funktion $\psi_{n=0} = A_0 \exp(iKx) + B_0 \exp(-iKx)$ an und bestimmen Sie den Energieeigenwert für ein freies Elektron(das Potential für $0 < x < a$ verschwindet).

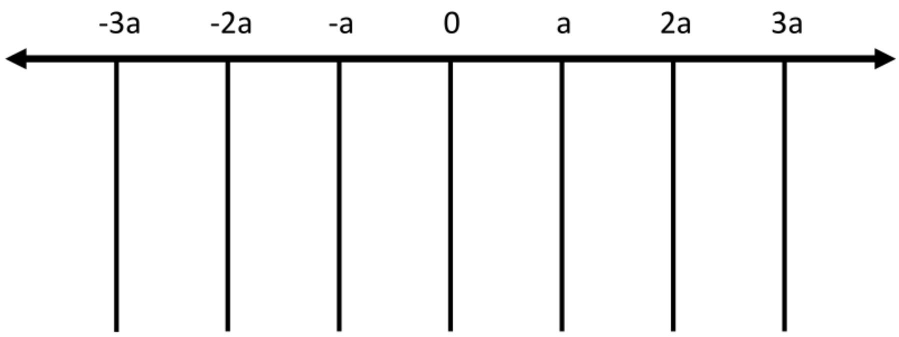

Abbildung 1: Potential zur Modellierung einer eindimensionalen, unendlich langen Kette von Atomen.

b) Um die vollständige Lösung zu erhalten, muss die Lösung aus $0 < x < a$ periodisch in die anderen Bereiche fortgesetzt werden. Dabei sind die Lösungen für die Bereiche $na < x < (n+1)a$ aufgrund des Blochtheorems durch $\psi_n = \psi_0 \exp(ikna)$ gegeben. Beachten Sie, dass es sich bei den Wellenvektoren k nicht um die Wellenvektoren K der Blochfunktion handelt. Überlegen Sie sich die Stetigkeitsbedingungen für ψ und $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ an der Stelle $x = 0$ und $x = a$.
Hinweis: Die Bedingung für die Ableitung erhalten Sie, indem Sie die Schrödingergleichung von $x_0 - \epsilon$ bis $x_0 + \epsilon$ integrieren.

c) Zeigen Sie, dass die beiden Gleichungen aus Aufgabenteil b, die sich aus der Stetigkeit und der Differenzierbarkeit der Wellen an den jeweiligen Bereichsgrenzen ergeben, genau dann Lösungen besitzen, wenn gilt:

$$\cos(ka) = \cos(Ka) + \frac{mV_0 a}{\hbar^2}\frac{\sin(Ka)}{Ka}.$$

Da $\cos(ka)$ nur Werte zwischen -1 und 1 annehmen kann, gibt es Werte von K, für die die Gleichung nicht erfüllt werden kann. Am besten macht man sich das graphisch klar, indem man die rechte Seite von der obigen Gleichung plottet und Bereiche findet, in denen der Wert dieser Funktion außerhalb des Intervalls $[-1; 1]$ liegt. Was bedeutet dies physikalisch für die möglichen Energieeigenwerte?

2. Aufgabe: Seebeck-Effekt für ein freies Elektronengas (6 Punkte)

Als Seebeck-Effekt bezeichnet man den experimentellen Befund, dass ein Temperaturgradient in einem Festkörper mit einem elektrischen Feld einhergeht. Es gilt $\vec{E} = Q \cdot \vec{\nabla} T$, wobei Q die sogenannte Thermokraft ist.
Zeigen Sie, dass für ein freies Elektronengas in der Relaxationszeitnäherung gilt:

$$Q = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_B}{e}\frac{k_B T}{E_F}.$$

Betrachten Sie hierzu einen endlichen Leiter aus isotropem Material, dessen Temperatur an einem Ende größer ist als am anderen. Überlegen Sie sich klassisch die durch den Temperaturgradienten hervorgerufene mittlere Diffusionsgeschwindigkeit der Elektronen sowie die Driftgeschwindigkeit bedingt durch das sich ergebende elektrische Feld. Beachten Sie, dass sich ein Gleichgewicht einstellt, wenn der Temperaturgradient stationär ist und die Ladungen an den Enden des Leiters nicht abfließen können. Hinweise zum Vorgehen:

a) Überlegen Sie sich die mittlere Diffusionsgeschwindigkeit in Richtung des kälteren Endes des Leiters zunächst in einer Dimension. Betrachten Sie hierzu die mittleren Geschwindigkeiten der Elektronen, die sich aus einem infinitesimalen Bereich mit größerer bzw. kleinerer Temperatur durch eine Schnittfläche senkrecht zum Temperaturgradienten bewegen. Benutzen Sie für den Übergang auf drei Dimensionen $\frac{1}{3}v^2 = v_x^2 = v_y^2 = v_z^2$ (für isotrope Medien).

b) Die spezifische Wärme eines freien Elektronengases ist laut Vorlesung $c_v = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F}$.

3. Aufgabe: Bloch-Theorem in einer Dimension (3 Punkte)

Ein Kristall bestehe aus N ringförmig angeordneten Atomen. Der Abstand zwischen zwei benachbarten Atomen sei d, sodass das Potential geschrieben werden kann als

$$V(x) = V(x + sd) \text{ mit } s \in \mathbb{Z}.$$

Aus Symmetriegründen ist zu erwarten, dass sich die Wellenfunktion in zwei benachbarten Abschnitten nur durch einen komplexen Faktor C unterscheidet. Demnach muss gelten

$$\Psi(x + d) = C\Psi(x). \tag{1}$$

a) Finden Sie einen Ausdruck für C in Abhängigkeit von N.

b) Zeigen Sie, dass $\Psi(x) = \exp(-ikd)\Psi(x + d)$ eine Lösung von (1) ist und bestimmen Sie $k(N, d)$

c) Zeigen Sie, dass die Lösung aus Teilaufgabe b die allgemeine Form des Bloch Theorems erfüllt.