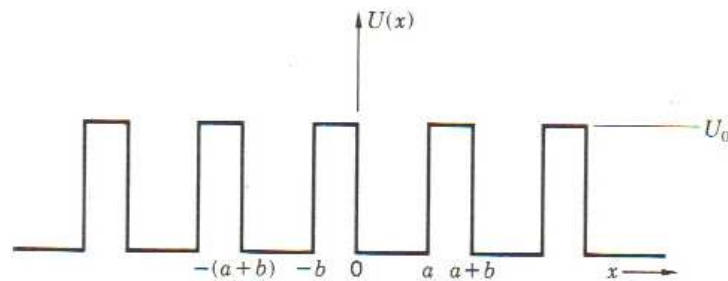


Θεωρία Υλικών
Εργασία 11
Παράδοση έως 15/01/2015

1. Θεωρήστε ηλεκτρόνιο στο μονοδιάστατο περιοδικό σύστημα με τη δυναμική ενέργεια του παρακάτω σχήματος 1. Το μοντέλο αυτό (R.L. Kronig, W.S. Penney, Proc. R. Soc. London Ser. A **130**, 499 (1930)) περιγράφει με σχετικά απλό τρόπο τον κβαντικό χαρακτήρα των ηλεκτρονίων σε περιοδικό δυναμικό πλέγματος και αναδεικνύει, μεταξύ άλλων, τη δημιουργία των ενεργειακών ζωνών και χασμάτων.



Σχήμα 1: Η δυναμική ενέργεια στο μοντέλο Kronig-Penney (από Kittel).

Στο όριο $b \rightarrow 0, U_0 \rightarrow \infty$, η δυναμική ενέργεια είναι

$$U(x) = A \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na),$$

όπου A είναι το εμβαδό του φράγματος και a η πλεγματική σταθερά.

Λύστε την χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

εφαρμόζοντας το θεώρημα Bloch και τις κατάλληλες οριακές συνθήκες (συνέχεια κυματοσυνάρτησης και ασυνέχεια πρώτης παραγώγου στο σημείο του φράγματος δυναμικού) και δείξτε ότι

$$\cos ka = \frac{P}{Ka} \sin Ka + \cos Ka,$$

όπου k είναι ο κυματαριθμός, $P = mAa/\hbar^2$ και $K = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

Δείξτε ότι η παραπάνω σχέση (από την οποία προκύπτει η σχέση διασποράς $E(k)$) δίδει την ενέργεια ελεύθερων ηλεκτρονίων στο όριο $P \rightarrow 0$

και απομονωμένου πηγαδιού στο όριο $P \rightarrow \infty$. Για την περίπτωση $P = 3\pi/2$, σχεδιάστε τη γραφική παράσταση της ποσότητας $(P/Ka) \sin Ka + \cos Ka$ σαν συνάρτηση της Ka και δείξτε τις περιοχές με επιτρεπτές τιμές της ενέργειας (ζώνες).

Υπόδειξη: εκτός απο το βιβλίο 'Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης' του Kittel, μπορεί να βρείτε χρήσιμο και το άρθρο 'Summary of the Kronig-Penney electron', J.C. Wolfe, Am. J. Phys. **46**, 1012 (1978).