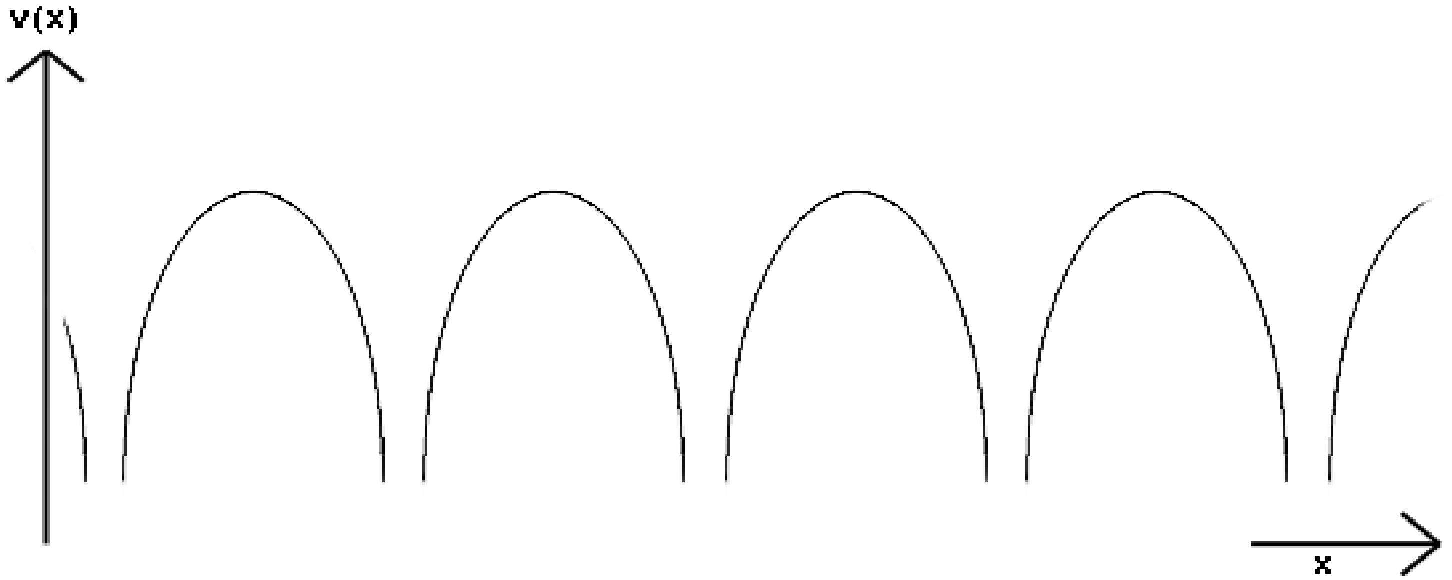
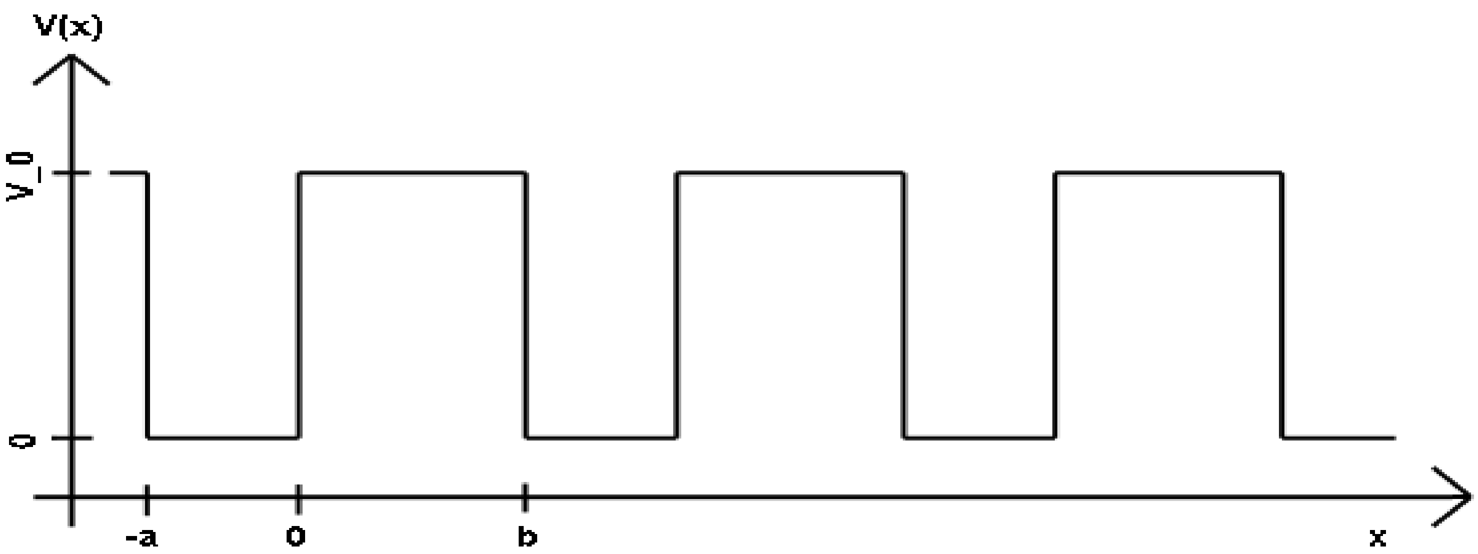
# Solid State Physics Fundamentals

Das Kronig-Penney-Modell

Periodisches Kristallpotential:




Kronig-Penney-Näherung:



# Stationäre Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

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

Für V(x) = 0 folgt:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi(x) = 0$$

$$\alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = ik$$

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} = A_2 \sin(kx) + B_2 \cos(kx)$$

Für V(x) = $V_0$:

$$\beta = \sqrt{-\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} = ik'$$

$$\psi_{II}(x) = C_1 e^{ik'x} + D_1 e^{-ik'x} = C_2 \sin(k'x) + D_2 \cos(k'x)$$

# Stetigkeitsbedingungen:

$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$:

$$B_2 = D_2 \qquad (i)$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial x}|_{x=0} = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}|_{x=0}$$

$$[k(A_2 \cos(kx) - B_2 \sin(kx))]_{x=0} = [k'(C_2 \cos(k'x) - D_2 \sin(k'x))]_{x=0}$$

$$kA_2 = k'C_2 \qquad (ii)$$

# Periodizitätsbedingungen:

Bloch‘sches Theorem: In einem gitterperiodischen Potential gilt:

$$\Phi_q(x+nl) = e^{iqnl}\Phi_q(x) \qquad , n \in \mathbb{Z}, \quad q \in [-\frac{\pi}{l}, \frac{\pi}{l}]$$

woraus folgt:

$$\psi_I(a) = e^{iq(a+b)}\psi_{II}(-b)$$

$$A_2 sin(ka) + B_2 cos(ka) = e^{iq(a+b)}(C_2 sin(-k'b) + D_2 cos(-k'b)) \qquad (iii)$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial x}|_{x=a} = e^{iq(a+b)}\frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}|_{x=-b}$$

$$k(A_2 cos(ka) - B_2 sin(ka)) = e^{iq(a+b)}k'(C_2 cos(-k'a) - D_2 sin(-k'b)) \qquad (iv)$$

(i) und (ii) in (iii) und (iv) einsetzen ergibt:

$$(iii) : A_2 sin(ka) + B_2 cos(ka) = e^{iq(a+b)}(-A_2 \frac{k}{k'} sin(k'b) + B_2 cos(k'b))$$

$$A_2(sin(ka) + \frac{k'}{k})e^{iq(a+b)} sin(k'b) + B_2(cos(ka) - e^{iq(a+b)} cos(k'b)) = 0$$

$$(iv) : k(A_2 cos(ka) - B_2 sin(ka)) = k' e^{iq(a+b)}(A_2 \frac{k}{k'} cos(k'b) + B_2 sin(k'b))$$

$$A_2 k(cos(ka) - e^{iq(a+b)} cos(k'b)) + B_2(-k' sin(ka) - k' e^{iq(a+b)} sin(k'b)) = 0$$

(iii) und (iv) können als Matrizengleichung angegeben werden:

$$\begin{pmatrix} sin(ka) + \frac{k}{k'}e^{iq(a+b)}sin(k'b) & cos(ka) - e^{iq(a+b)}cos(k'b) \\ k(cos(ka) - e^{iq(a+b)}cos(k'a)) & -ksin(ka) - k'e^{iq(a+b)}sin(k'b) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

charakteristische Gleichung:

$$(sin(ka)+\frac{k}{k'}e^{iq(a+b)}sin(k'b))(-ksin(ka)-k'e^{iq(a+b)}sin(k'b))-(k(cos(ka)- e^{iq(a+b)}cos(k'b))(cos(ka) - e^{iq(a+b)}cos(k'b))) = 0$$

$$-2k - (\frac{k^2}{k'} + k') - \frac{k^2+(k')^2}{2kk'}sin(ka)sin(k'b) + 2ke^{iq(a+b)}cos(ka)cos(k'b) = 0$$

$$cos(ka)cos(k'b) - \frac{k^2+(k')^2}{2kk'}sin(ka)sin(k'b) = e^{iq(a+b)} = cos(q(a+b))$$

Für $0 < E < V_0$:

$$cos(ka)cosh(\kappa b) - \frac{k^2-\kappa^2}{2k\kappa}sin(ka)sinh(\kappa b) = cos(q(a+b))$$

Für $E > V_0$:

$$cos(ka)cos(k'b) - \frac{k^2+(k')^2}{2kk'}sin(ka)sin(k'b) = cos(q(a+b))$$

mit: $k = k_0\sqrt{\eta}$

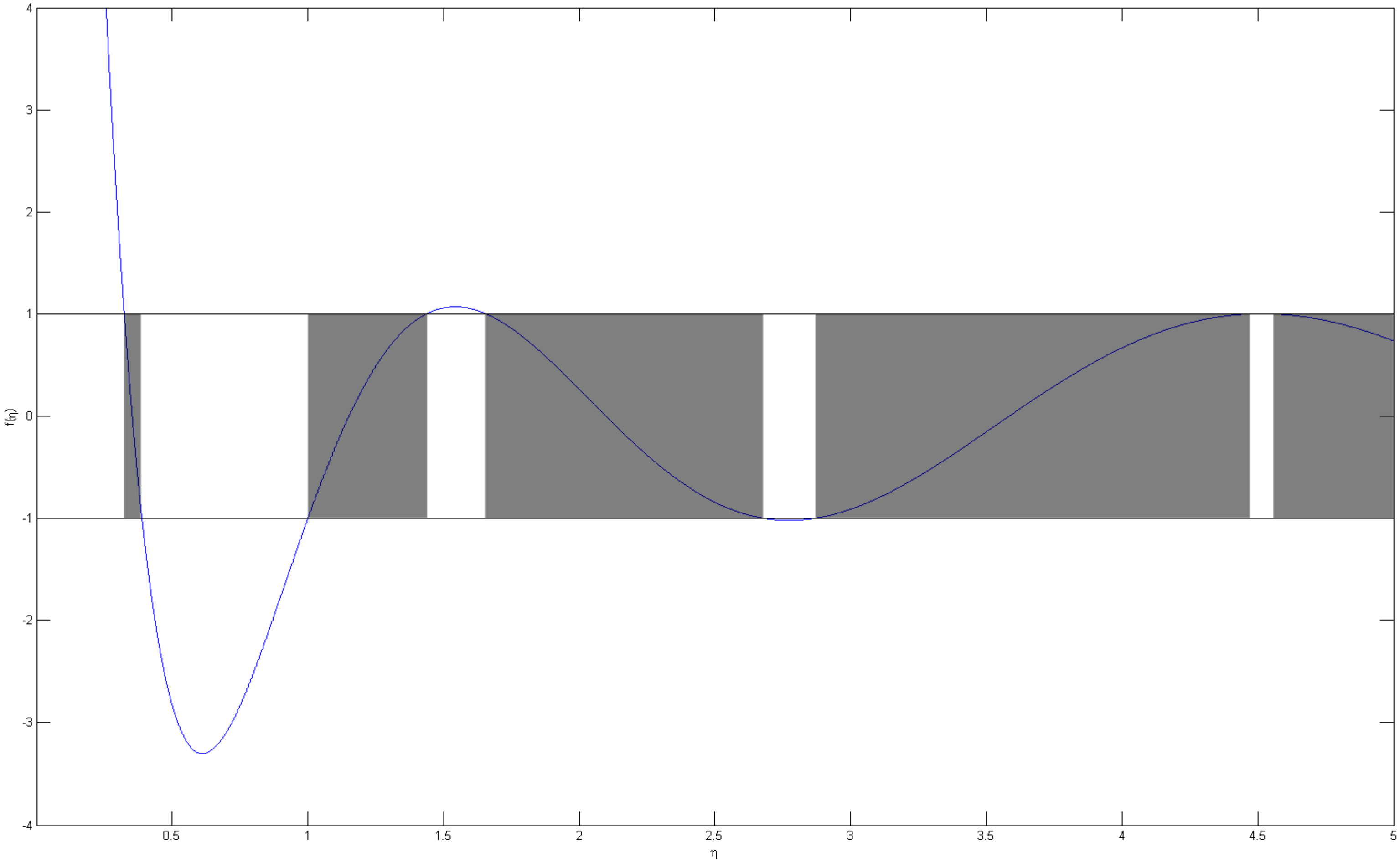
$\kappa = k_0\sqrt{1-\eta}$ bzw. $k' = k_0\sqrt{\eta - 1}$

$(k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad , \eta = \frac{E}{V_0})$

folgt:

$$cos(q(a+b)) = \begin{cases} cos(k_0 a\sqrt{\eta})cosh(k_0 b\sqrt{1-\eta}) + \frac{1-2\eta}{2\sqrt{\eta(1-\eta)}} sin(k_0 a\sqrt{\eta}) sinh(k_0 b\sqrt{1-\eta}) & \text{für } 0 < E < V_0 \\ cos(k_0 a\sqrt{\eta})cos(k_0 b\sqrt{1-\eta}) + \frac{1-2\eta}{2\sqrt{\eta(1-\eta)}} sin(k_0 a\sqrt{\eta}) sin(k_0 b\sqrt{1-\eta}) & \text{für } E > V_0 \end{cases}$$

# Erlaubte Elektronenenergien:



# Kronig-Penney Energiebänder: