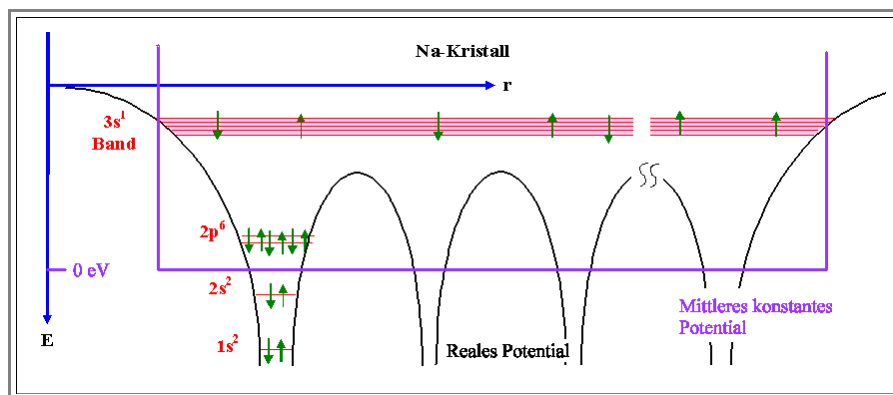


Übung 2.3-1

Lösung der Schrödingergleichung für einen Kristall in der Approximation des "freien Elektronengases"

Das in die Schrödingergleichung einzusetzende Potential haben wir [schon mal gezeichnet](#):



- Wir könnten das mal in einer ersten Näherung als eine Sinusfunktion ausdrücken (oder gleich als Fourierreihe), in die Schrödingergleichung einsetzen und mal sehen, wie weit wir mit dem jetzt *rein mathematischen* Problem kommen.
- Nicht weit. Also machen wir eine radikale Vereinfachung: Wir ersetzen das reale *periodische* Potential durch ein mittleres *konstantes* Potential $U = 0 \text{ eV}$, d. h. wir legen auch den Energienullpunkt auf dieses Potential. Außerdem schauen wir zunächst *nur* die x -Richtung an, d. h. wir behandeln das Problem erst mal eindimensional

Gegeben ist damit eine auch im 2. Semester lösbare eindimensionale [Schrödingergleichung](#) mit dem Potential:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$
$$U(x) = \begin{cases} U_0 = \text{const.} = 0 \text{ eV} & \text{für } 0 \leq x \leq L_x \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

- Wir haben damit sozusagen einen eindimensionalen "Modellkristall" der Länge L_x postuliert.

Nun zur Aufgabe.

1. Zeige, dass die allgemeine eindimensionale Lösung (unter Benutzung der [Normierungsbedingung](#)) die folgende Form hat:

$$\psi(r) = \left(\frac{1}{L_x} \right)^{1/2} \cdot \exp(i k_x x)$$

- Immer vorausgesetzt, daß gilt:

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e}$$

2. Zeige, daß wir damit auch die **drei** dimensionale Lösung für einen Kristall der Ausdehnung $L_x = L_y = L_z = L$ haben (unter Benutzung der dreidimensionalen [Normierungsbedingung](#)), in der Form

$$\psi(\underline{r}) = \left(\frac{1}{L} \right)^{3/2} \cdot \exp(i \underline{k} \cdot \underline{r})$$

● Mit Wellenvektor $\underline{k} = (k_x, k_y, k_z)$ und Ortsvektor \underline{r} .

3. Zeige, daß die unten angeführten Gleichungen für den [Wellenvektor](#) \underline{k} sich aus den **periodischen Randbedingungen** $\psi(\underline{r} + L) = \psi(\underline{r})$ ergibt.

● (Wer Lust hat, darf auch gern alternativ für **feste Randbedingungen** der Form $\psi(0) = \psi(L) = 0$ ausprobieren.)

$$k_x = \pm \frac{n_x \cdot 2\pi}{L} \quad k_y = \pm \frac{n_y \cdot 2\pi}{L} \quad k_z = \pm \frac{n_z \cdot 2\pi}{L}$$

● Dabei sind die $n_{x,y,z}$ offenbar die **Quantenzahlen** mit denen die ∞ vielen Lösung durchnumeriert werden können; ihr Wertebereich ist **0, ± 1 , ± 2 , ...**

4. Jetzt zu den schwierigen Fragen:

● Was bedeutet diese Lösung für Elektronen im "Kristall" anschaulich?

● Wo befindet sich das Elektron eigentlich?

● Wo sind die Energieniveaus in diesem rechteckigen Potentialtopf? Die ersten **10** oder so kann man ausrechnen und einzeichnen. Wie groß ist dabei der Entartungsgrad, d. h. wieviel Elektronen haben auf einem Niveau Platz?

● Was passiert, falls wir mehr als ein Elektron betrachten?

Die Aufgabe mag schwierig erscheinen; das darin codierte "**freie Elektronengasmodell**" ist aber das grundlegende Paradigma der gesamten Halbleiterei! Es wird uns nicht erspart bleiben!

Lösung