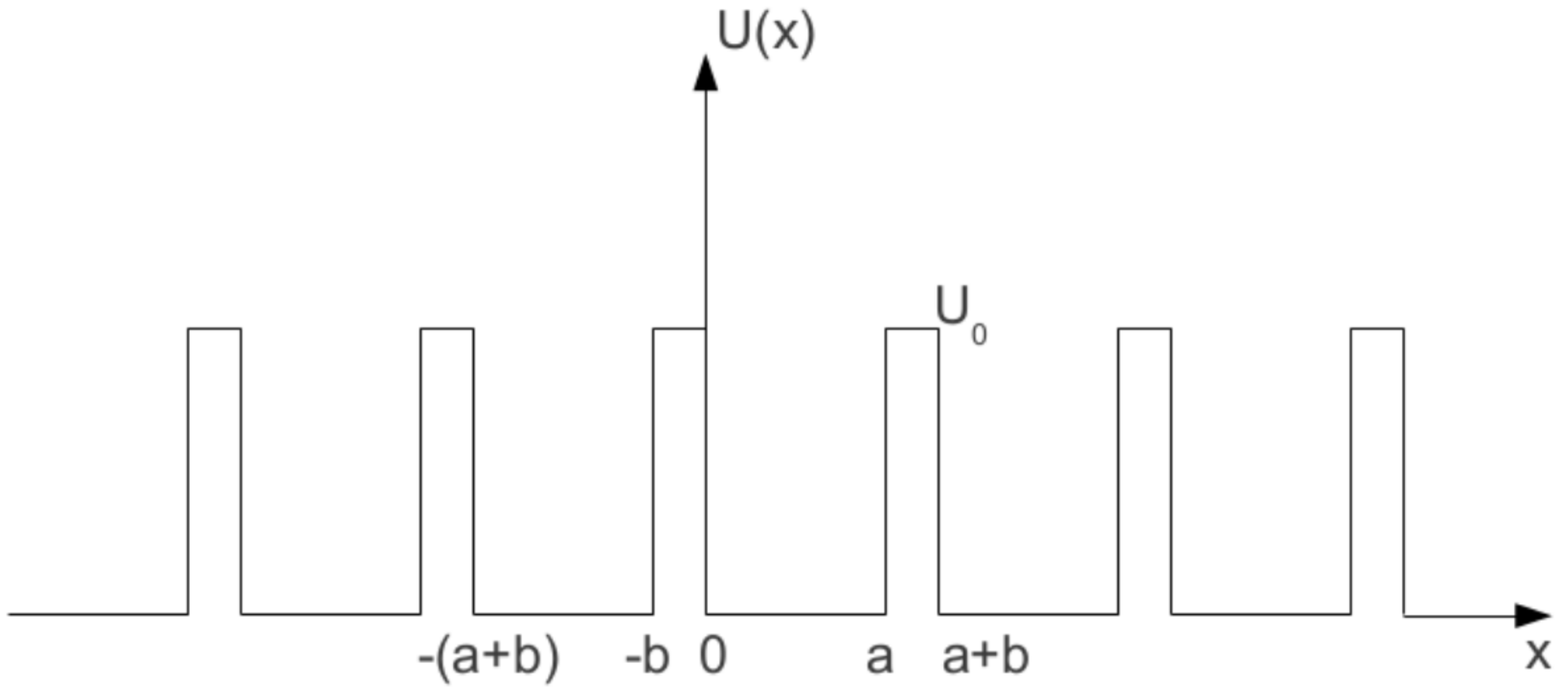
Approfondimento Lezione 7

Mara Bruzzi

Il modello di Kronig-Penney

Dimostra che un potenziale periodico
monodimensionale produce bande
di energia distanziate da gap di energia proibita.

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ U_0 & -b < x < 0 \end{cases} .$$



a = costante reticolare
b = spessore della barriera di potenziale
U_0 = altezza della barriera di potenziale

Risolviamo l'equazione di Schroedinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right)\phi_{nk}(x)=E_{nk}\phi_{nk}(x)$$

Per E < U_0 . Otteniamo la soluzione generale:

$$\phi_{kn}(x) = \begin{cases} Ae^{iKx}+Be^{-iKx} & 0<x<a \\ Ce^{Qx}+De^{-Qx} & -b<x<0 \end{cases}.$$

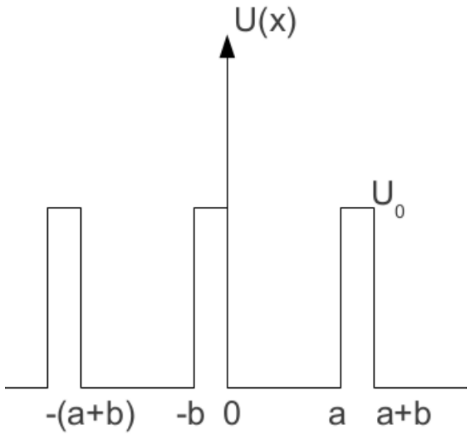
Con:

$$K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$Q = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$$

Il teorema di Bloch impone che :

$$\phi_{nk}(a<x<a+b)=\phi_{nk}(-b<x<0)e^{ik(a+b)}$$



condizione che definisce il vettor d'onda di Bloch da usare come indice per indicare la soluzione.

Le costanti A, B, C e D vengono determinate imponendo le condizioni al contorno tali che la funzione e la sua derivata si raccordino in x = 0 ed x = a.

x = 0

$$
\begin{aligned}
A + B &= C + D \\
iK(A - B) &= Q(C - D)
\end{aligned}
$$

x = a

$$
\begin{aligned}
Ae^{iKa} + Be^{-iKa} &= \left(Ce^{-Qb} + De^{Qb}\right) e^{ik(a+b)} \\
iK\left(Ae^{iKa} - Be^{-iKa}\right) &= Q\left(Ce^{-Qb} - De^{Qb}\right) e^{ik(a+b)}
\end{aligned}
$$

Avendo utilizzato la condizione di Bloch per x = a :

$$\phi(-b)e^{ik(a+b)} = \phi(a)$$

$$\phi'(-b)e^{ik(a+b)} = \phi'(a)$$

Il sistema delle quattro equazioni sulle incognite A,B,C,D ha soluzione se il determinante dei coefficienti si annulla:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ iK & -iK & -Q & Q \\ e^{iKa} & e^{-iKa} & -e^{-Qb}e^{ik(a+b)} & -e^{Qb}e^{ik(a+b)} \\ iKe^{iKa} & -iKe^{-iKa} & -Qe^{-Qb}e^{ik(a+b)} & Qe^{Qb}e^{ik(a+b)} \end{vmatrix} = 0$$

che porta alla relazione:

$$\left(\frac{Q^2 - K^2}{2QK}\right) \sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a+b)$$

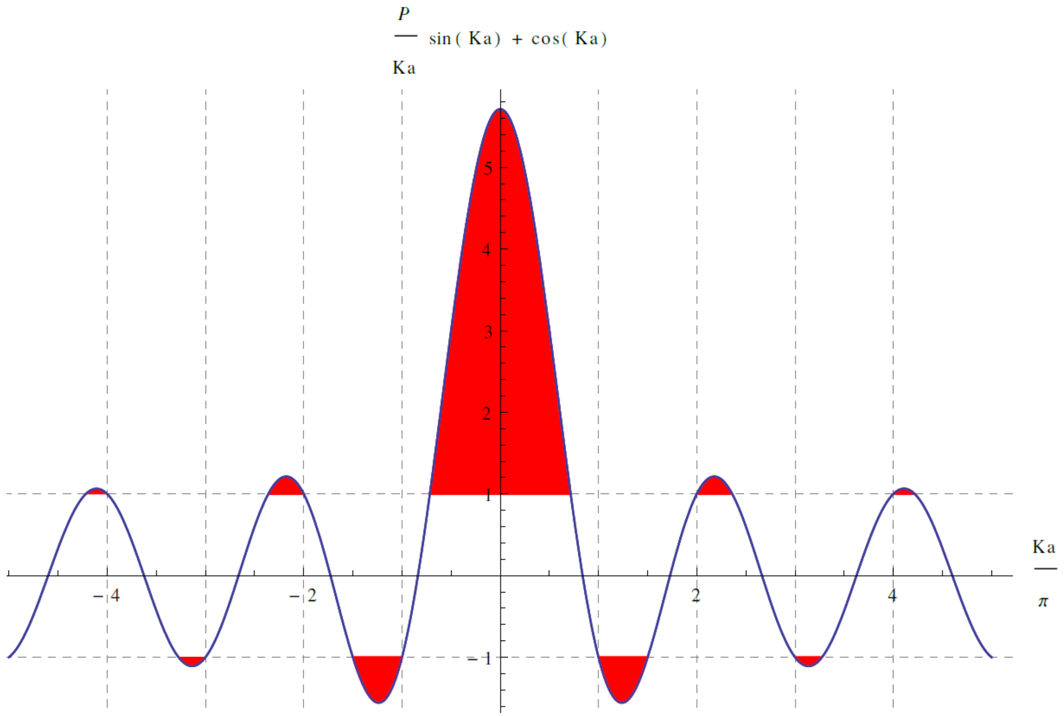
Per semplicità poniamo il caso limite in cui b → 0 e U0 → ∞ ed il termine $\frac{Q^2 ba}{2}$=P sia costante, per cui Q >>K e Qb << 1 . Otteniamo :

$$f(Ka) = \frac{P}{Ka}\sin Ka + \cos Ka = \cos ka$$

Notiamo che le sole energie permesse sono quelle per cui -1 ≤ f(Ka) ≤ 1 con:

$$Ka = a\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

In figura l'esempio per P = 3π/2.



Risolvendo l'equazione per k vettore di Bloch (non K !) otteniamo la dipendenza dell'energia con la conseguente formazione delle bande   proibite, per k = π/a n dovute alle regioni dove f(Ka) > 1 e f(Ka) < -1.