**8. Übungsblatt: Lösungen**

Verteilung 13. November 2007
Besprechung 21./22. November 2007

Unter http://fermi.la.asu.edu/ccli/applets/kp/index.html finden Sie ein schönes Java-Applet zu diesem Modell (mit allerdings recht hohen anfänglichen Ladezeiten).

1. **Translationsoperator**
   Die Verschiebung einer Wellenfunktion $\varphi(x)$ um $a$ kann mit $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$ geschrieben werden als

$$\begin{aligned}\psi(x+a) &= \sum_n \frac{1}{n!}a^n \frac{d^n}{dx^n}\psi(x) \\ &= \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n p^n \psi(x) \\ &\equiv T(a)\psi(x).\end{aligned}$$

   Dabei wurde die Taylor-Entwicklung von $\psi(x+a)$ benutzt. Die Bedingung "kleine $a$" bedeuted hierbei, dass der Konvergenzradius der Potenzreihe mindestens $a$ betragen soll.
   Damit ergibt sich der Translationsoperator $T(a) = \exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right)$. Daraus folgt mit $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{2m}p^2$

$$\left[T(a), \frac{1}{2m}p^2\right] = 0.$$

   Zudem gilt:

$$\begin{aligned}\left[T(a), V(x)\right]\psi(x) &= T(a)[V(x)\psi(x)] - V(x)T(a)\psi(x) \\ &= V(x+a)\psi(x+a) - V(x)\psi(x+a) = 0\end{aligned}$$

2. **Bloch-Theorem**
   Die eindimensionale Schrödinger-Gleichung ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung und besitzt daher zwei linear unabhängige Lösungen $\psi_{E_1}$ und $\psi_{E_2}$ zu jedem Eigenwert E. Da $[T(a), H] = 0$, kann man $\psi_{E_1}$, $\psi_{E_2}$ gleichzeitig als Eigenfunktionen von $T(a)$ wählen:

$$T(a)\psi_{E_i}(x) = \psi_{E_i}(x+a) = \lambda_{E_i}\psi_{E_i}(x) \qquad\qquad i = 1, 2.$$

   Die $\lambda_{E_i}$ sind die (energieabhängigen) Eigenwerte des Translationsoperators. Wegen $H\psi_{E_i} = E\psi_{E_i}$ ist

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}W(x) &= \frac{d}{dx}[\psi_{E_1}(x)\psi'_{E_2}(x) - \psi_{E_2}(x)\psi'_{E_1}(x)] \\ &= \psi'_{E_1}\psi'_{E_2} - \psi'_{E_2}\psi'_{E_1} + \psi_{E_1}\psi''_{E_2} - \psi_{E_2}\psi''_{E_1} \\ &= \psi_{E_1}\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\psi_{E_2} - \psi_{E_2}\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\psi_{E_1} \\ &= 0.\end{aligned}$$

   Daher ist $W(x) = const.$
   Da auch $W(x) = W(x+a) = \lambda_{E_1}\lambda_{E_2}W(x)$ gilt, folgt also $\lambda_{E_1}\lambda_{E_2} = 1$ (W(x) ist eine Eigenfunktion von T(a)).
   Ausserdem ist

$$\psi^*_{E_i}(x+a) = T(a)\psi^*_{E_i}(x) = \lambda^*_{E_i}\psi^*_{E_i}(x).$$

   Die $\lambda^*_{E_i}$ sind also ebenfalls Eigenwerte von $T(a)$, können aber wegen der linearen Unabhängigkeit von $\psi_{E_1}$ und $\psi_{E_2}$ nicht von $\lambda_{E_i}$ verschieden sein. Es ist daher entweder

$$\lambda^*_{E_1} = \lambda_{E_1} \qquad \lambda^*_{E_2} = \lambda_{E_2} \qquad \Rightarrow \lambda_{E_i} \in R$$

oder

$$\lambda_{E_1}^* = \lambda_{E_2} \qquad \lambda_{E_2}^* = \lambda_{E_1} \qquad \Rightarrow \mid \lambda_{E_i} \mid^2 = 1$$

Im ersteren Fall sei oBdA $\lambda_{E_1} > 1$. Dann kann aber $\psi_{E_1}(x)$ nicht quadratintegrabel sein.
Es muss also der zweite Fall zutreffen und man wählt $\lambda_{E_1} = e^{i\alpha_E}, \quad \lambda_{E_2} = e^{-i\alpha_E}, \quad \alpha_E \in \mathrm{R}$
($\alpha_E = 0$ schliesst den Fall $\lambda_E = 1$ ein).
Definiert man $k_E = \alpha_E / a$, so erhält man

$$\psi_{E_1}(x+a) = e^{ik_E a}\psi_{E_1}(x) \qquad und \qquad \psi_{E_2}(x+a) = e^{-ik_E a}\psi_{E_2}(x).$$

In der Zerlegung

$$\psi_{E_i}(x) = e^{ik_E x}\phi_{E_i}(x)$$

muss wegen

$$e^{ik_E a}e^{ik_E x}\phi_{E_1}(x) = e^{ik_E a}\psi_{E_1}(x) = \psi_{E_1}(x+a) = e^{ik_E a}e^{ik_E x}\phi_{E_1}(x+a)$$

gelten:

$$\phi_{E_1}(x+a) = \phi_{E_1}(x)$$

(für i = 2 geht der Beweis analog). Man unterdrückt i.A. den Index $E$ an der Wellenfunktion und schreibt

$$\psi_k(x) = e^{ikx}\phi_k(x)$$

wobei $\psi_k$ und $\psi_{-k}$ linear unabhängig sind und $\phi_k$ periodisch ist.

3. Man verwendet als Ansatz ebene Wellen: Im Bereich $0 < x < a$ ist $V(x) = 0$, d.h.

$$\psi_k(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x} \qquad mit \qquad \kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad x \in (0, a).$$

Für die um eine Gitterkonstante verschobene Wellenfunktion gilt nach dem Bloch-Theorem

$$\psi_k(x) = e^{ika}\psi_k(x-a).$$

Also muss im Bereich $x \in (a, 2a)$ gelten:

$$\psi_k(x) = e^{ika}[Ae^{i\kappa(x-a)} + Be^{-i\kappa(x-a)}].$$

Zwischen diesen beiden Darstellungen muss man nun die Anschlussbedingungen finden.
Die Wellenfunktion $\psi$ ist bei $x = a$ stetig, nicht aber die Ableitung von $\psi$, wie man durch Integration der Schrödinger-Gleichung von $a - \epsilon$ bis $a + \epsilon$ feststellt (siehe auch Übung 4 Aufgabe 1):

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \left\{ E\psi(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\psi^{''}(x) - V(x)\psi(x) \right\} \\ &= \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \left\{ E\psi(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\psi^{''}(x) - V_0\delta(x-a)\psi(x) \right\} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{'}(a+0) - \frac{\hbar^2}{2m}\psi^{'}(a-0) + V_0\psi(a) = 0 \qquad wenn \qquad \epsilon \to 0.$$

Die Wellenfunktion $\psi$ ist bei $x = a$ stetig und mit der Bedingung aus obiger Integration gilt:

$$\psi(a-0) = \psi(a+0) \qquad \psi^{'}(a+0) - \psi^{'}(a-0) + \frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi(a) = 0.$$

Insgesamt ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$Ae^{i\kappa a} + Be^{-i\kappa a} = (A+B)e^{ika}$$

$$e^{ika}(i\kappa A - i\kappa B) - (i\kappa Ae^{i\kappa a} - i\kappa Be^{-i\kappa a}) + \frac{2m}{\hbar^2}V_0(Ae^{i\kappa a} + Be^{-i\kappa a}) = 0,$$

oder in Matrix-Schreibweise:

$$\begin{bmatrix} -e^{ika}+e^{i\kappa a} & e^{-i\kappa a}-e^{ika} \\ i\kappa(e^{ika}-e^{i\kappa a})+\frac{2m}{\hbar^2}V_0e^{i\kappa a} & -i\kappa(e^{ika}-e^{-i\kappa a})+\frac{2m}{\hbar^2}V_0e^{-i\kappa a} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

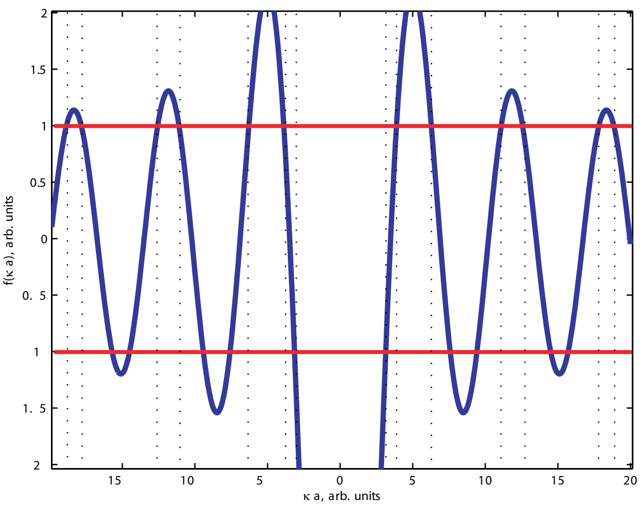
Die Lösbarkeitsbedingung für dieses Gleichngssystem erhält man durch Nullsetzen der Determinaten:

$$\begin{aligned} 0 &= -i\kappa(e^{i\kappa a}-e^{ika})(e^{ika}-e^{-i\kappa a}) - i\kappa(e^{ika}-e^{i\kappa a})(e^{-i\kappa a}-e^{ika}) \\ &\quad + \frac{2m}{\hbar^2}V_0[(1-e^{i(k-\kappa)a})+(e^{i(\kappa+k)a}-1)] \\ &= -i\kappa(2e^{i(k+\kappa)a}-2-2e^{2ika}+2e^{i(k-\kappa)a}) + \frac{2m}{\hbar^2}V_0(e^{i\kappa a}-e^{-i\kappa a})e^{ika}. \end{aligned}$$

Daraus folgt nach Multiplikation mit $e^{-ika}$ und Division durch $-4i\kappa$ die Eigenwertgleichung

$$cos(ka) = cos(\kappa a) - \frac{amV_0}{\hbar^2}\frac{sin\kappa a}{\kappa a} \equiv f(\kappa a). \tag{1}$$

Diese Gleichung stellt eine Beziehung zwischen $k$ und $E$ her. Statt $E$ vorzugeben und $k$ auszurechnen, kann man auch $k$ vorgeben und $E$ ausrechnen, was auf graphischem Wege machbar ist.




Wegen $\mid cos(ka) \mid \leq 1$ hat man für $\mid f(\kappa a) \mid > 1$ keine Lösung der Eigenwertgleichung.

**1.Fall:** $E < 0$ (gebundene Zustände), $\kappa = i\beta$, $\beta \in R_+*$, $\beta = \mid 2mE/\hbar^2 \mid^{1/2}$ .
Nun ist $\sin i\beta = i\sinh\beta$, $\cos i\beta = \cosh\beta$ und

$$f(i\beta a) = \cosh(\beta a) - \frac{amV_0}{\hbar^2}\frac{sinh(\beta a)}{\beta a}$$

ist eine monoton wachsende, gerade Funktion, die bei $\beta_0 a$ grösser als 1 wird. Für Werte grösser als 1 gibt es keine Lösung mehr. Es liegt also der gebundenene Grundzustand vor und es gilt:

$$\mid E \mid = \beta_0^2\frac{\hbar^2}{2m} \equiv E_0.$$

**2. Fall:** $E > 0$, $\kappa \in R_+$,
$f(\kappa a)$ ist gerade und die "Einsstellen" liegen bei $\kappa a = x$ mit

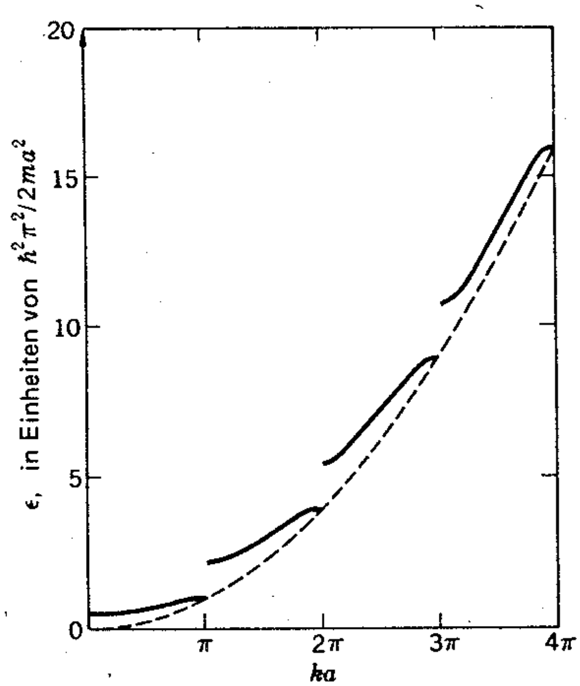
$$\cos x - \frac{amV_0}{\hbar^2}\frac{\sin x}{x} = 1 \qquad d.h. \qquad -\frac{amV_0}{\hbar^2}\frac{2}{x}\sin\frac{x}{2}\cos\frac{x}{2} = 2\sin^2\frac{x}{2}.$$

Dies ist erfüllt für

$$\sin\frac{x}{2} = 0 \qquad oder \qquad \tan\frac{x}{2} = -\frac{amV_0}{2\hbar^2}\frac{1}{x/2}$$

d.h. für $(x_1)_n = 2n\pi$ und $(x_2)_n = 2n\pi - \Delta(n\pi)$ mit $n \in N$ $(n \neq 0)$, wobei $lim_{n\to\infty}\Delta(n\pi) = 0$.
Nun ist $\cos x - \frac{2amV_0}{\hbar^2}\frac{\sin x}{x} = 1$ für $x = 2\pi n$ erfüllt, während für $x$ geringfügig *kleiner* als $2\pi$ der Sinus negativ wird. Dann wird die rechte Seite (siehe Gl.1) grösser als 1 und es existiert keine Lösung mehr.
Die "$(-1)$-Stellen" findet man analog bei $(x_1^{'})_n = (2n-1)\pi$ und $(x_2^{'}) = (2n-1)\pi - \Delta[(2n-1)\pi]$. Zwischen $(x_2)_n$ und $(x_1)_n$ bzw. $(x_2^{'})_n$ und $(x_1^{'})_n$ gibt es keine erlaubten Energieeigenwerte.

Die graphische Darstellung der Energie in Abhängigkeit von der Wellenzahl $k$ ist durch "verbotene Zonen" charakterisiert, die mit wachsendem $k$ immer kleiner werden. Teilchen mit Energien in einer Lücke können keinen propagieren Zustand einnehmen. Das Spektrum zerfällt in erlaubte Energiebereiche (Energiebänder) und unerlaubte Energiebereiche (Energielücken oder Energiegaps).




## Verständnisfragen zum Bloch-Theorem

1. Antwort A.
   Die Periodizität der Wellenfunktion im $k$-Raum ist gegeben durch die Periodizität des Potentials (reziproke Gittervektoren), aber unabhängig von Amplitude und Form des Potentials.

2. Antwort A.
   Siehe 1.

3. Antwort C.
   Die parabolische Dispersion des freien Elektronengases geht im quasi-freien Elektronengas von allen Punkten des reziproken Gitters aus. Somit entsteht die zweitunterste Bandlücke am Schnittpunkt mit der um zwei reziproke Gittervektoren verschobenen Parabel. Die zweitunterste Bandlücke ist somit durch die zweite Fourierkomponente bestimmt (vgl. Herleitung des Bloch-Theorems in der Vorlesung).