

Kapitel 2.1 : Potential ist symmetrisch : $V(-x) = V(x)$

$\Rightarrow$ Wellenfunktion ist symmetrisch $[\Psi_E(-x) = \Psi_E(x)]$
 oder antisymmetrisch $[\Psi_E(-x) = -\Psi_E(x)]$

(d.h. Eigenfunktion des Paritätsoperators $P\Psi_E(x) \equiv \Psi_E(-x)$)

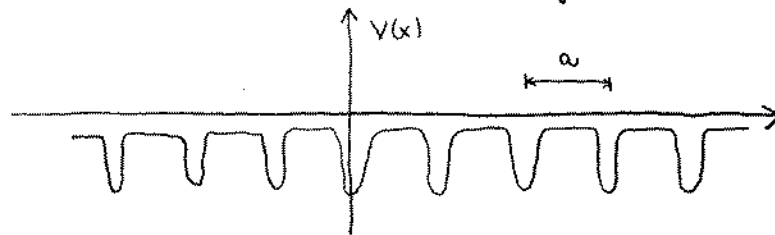
$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsdichte ist symmetrisch :

$$|\Psi_E(-x)|^2 = |\Psi_E(x)|^2$$

Betrachten wir jetzt ein Potential, das periodisch ist :

$$V(x+na) = V(x) \quad \forall x, \forall n \in \mathbb{Z}$$

Hier wird $a > 0$ die Gitterkonstante genannt. Zum Beispiel:



Sicherlich gilt jetzt $|\Psi_E(x+na)|^2 = |\Psi_E(x)|^2$, aber wie ist es mit $\Psi_E(x+na)$ selbst?

Ansatz: $\Psi_E(x+na) = e^{if(na)} \Psi_E(x)$

Dann gilt: (i) $|\Psi_E(x+na)|^2 = e^{i[f(na) - f^*(na)]} |\Psi_E(x)|^2 \Rightarrow f \in \mathbb{R}$.

$$(ii) \quad \Psi_E(x+a) = e^{if(a)} \Psi_E(x) \quad | \quad x \rightarrow x+a$$

$$\Psi_E(x+2a) = e^{if(a)} \Psi_E(x+a) = e^{i2f(a)} \Psi_E(x)$$

Aber auch:

$$\Psi_E(x+2a) = e^{if(2a)} \Psi_E(x)$$

$$\Rightarrow f(2a) = 2f(a) \quad ; \quad f(na) = nf(a)$$

$$\Rightarrow f \text{ ist linear} \Rightarrow f(na) \equiv Kna, \quad K \in \mathbb{R}$$

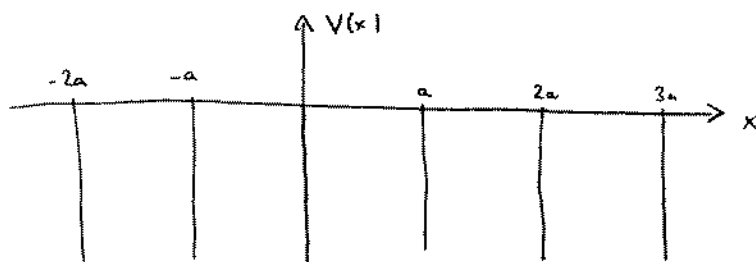
Also :

$$\underline{\Psi_E(x+na) = e^{iKna} \Psi_E(x)}$$

"Blochsche Satz"

Um zu verifizieren, daß dieser Ansatz tatsächlich funktioniert, und um K zu finden, müssen wir $V(x)$ genauer spezifizieren.
Ein einfaches Beispiel:

$$V(x) \equiv -\Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x+na), \quad \Omega > 0.$$



"ein Kammpotential"

$$\underline{\underline{0 < x < a}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \psi_E(x) = E \psi_E(x), \quad E \equiv \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \geq 0 ! \quad *$$

$$\psi_E'' = -k_0^2 \psi_E$$

$$\psi_E = A \cdot e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x}$$

$$\underline{\underline{a < x < 2a}}$$

$$\psi_E(x+a) = e^{ika} \psi_E(x), \quad 0 < x < a$$

$$\Leftrightarrow \psi_E(x) = e^{ika} \psi_E(x-a), \quad a < x < 2a$$

$$\psi_E = e^{ika} \left[A e^{ik_0(x-a)} + B e^{-ik_0(x-a)} \right]$$

Anschlußbedingungen

* Seite 22: keine δ' in $V(x) \Rightarrow \psi_E$ ist stetig!

* Aber: es gibt δ in $V(x) \Rightarrow \psi_E'$ ist nicht stetig!

_____ o _____

* Es gibt auch ein diskretes Spektrum von Lösungen mit $E < 0$!

Wie groß ist die Unstetigkeit von Ψ'_E ? In der Nähe von $x=a$:

$$-\Psi_E'' - \frac{2m\Omega}{\hbar^2} \delta(x-a) \Psi_E = k_0^2 \Psi_E \quad \Bigg| \int_{a^-}^{a^+} dx \quad : a^\pm \equiv a \pm 0^+$$

$$-\left[\Psi_E' \right]_{a^-}^{a^+} - \frac{2m\Omega}{\hbar^2} \Psi_E(a) = 0$$

$$\underline{\underline{\Psi_E'(a^+) - \Psi_E'(a^-) = -\frac{2m\Omega}{\hbar^2} \Psi_E(a)}}$$

Also:

$$\begin{cases} \Psi_E(a^-) = \Psi_E(a^+) & \Leftrightarrow A e^{ika} + B e^{-ika} = e^{ika} [A+B] \\ \Psi_E'(a^-) = \Psi_E'(a^+) + \frac{2m\Omega}{\hbar^2} \Psi_E(a) & \Leftrightarrow ik_0 [A e^{ika} - B e^{-ika}] = ik_0 e^{ika} [A+B] + \frac{2m\Omega}{\hbar^2} e^{ika} [A+B] \end{cases}$$

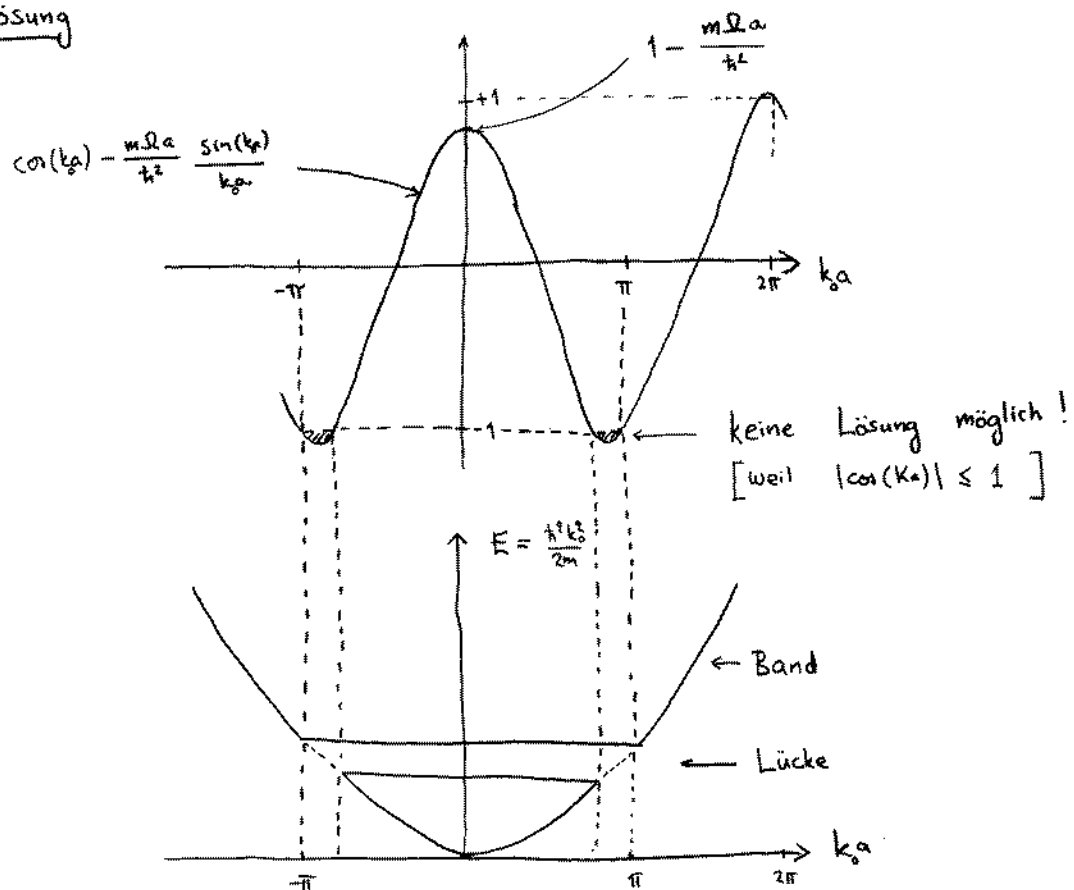
$\Leftrightarrow$

$$\begin{pmatrix} e^{ika} - e^{ika} & e^{-ika} - e^{ika} \\ ik_0(e^{ika} - e^{ika}) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2} e^{ika} & -ik_0(e^{-ika} - e^{ika}) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2} e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Es gibt eine nicht-triviale Lösung genau dann, wenn $\text{Det}(\because) = 0$.

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow & \begin{aligned} & -ik_0(1 - e^{ika} e^{ika} - e^{-ika} e^{ika} + e^{2ika}) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2} (e^{ika} e^{ika} - e^{2ika}) \\ & -ik_0(1 - e^{ika} e^{ika} - e^{-ika} e^{ika} + e^{2ika}) + \frac{2m\Omega}{\hbar^2} (e^{-ika} e^{ika} - e^{2ika}) = 0 \end{aligned} \quad \Bigg| \cdot e^{-ika} \\ & \begin{aligned} & -2ik_0(e^{ika} + e^{-ika} - e^{ika} - e^{-ika}) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2} (e^{ika} - e^{-ika}) = 0 \\ & -k_0 \left(\frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2} - \frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2} \right) - \frac{m\Omega}{\hbar^2} \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right) = 0 \end{aligned} \quad \Bigg| \cdot \frac{1}{4i} \\ & \quad \quad \quad \Bigg| \cdot \frac{1}{k_0} \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{\cos(Ka) = \cos(k_0 a) - \frac{m\Omega}{\hbar^2 k_0} \sin(k_0 a)}}$$

Graphische LösungFazit:

- * Wir finden ein kontinuierliches Spektrum für $E > 0$, aber mit einer Bandstruktur.
- * Physik: Elektronen auf einem Gitter. Nimmt man dazu noch das Pauli-Prinzip (keine zwei Fermionen in demselben Zustand) kriegt man:
 - Band voll $\Rightarrow$ ein kleiner Energiestoß ändert nichts $\Rightarrow$ Isolator.
 - Band halbvoll $\Rightarrow$ Leiter.
 - Band voll aber Lücke klein $\Rightarrow$ Halbleiter.