2.2 Teilchen im Gitterpotential [Fliessbach 19, Griffiths 2.5]

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

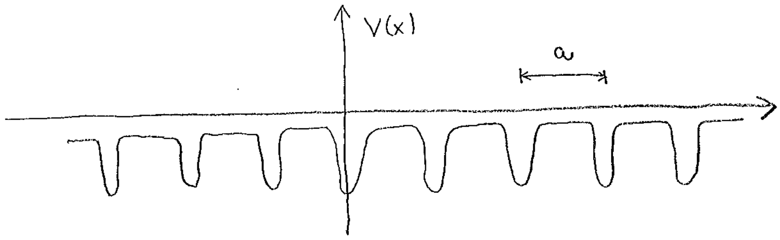
$\Rightarrow$ Wellenfunktion ist symmetrisch $[\psi_E(-x) = \psi_E(x)]$
oder antisymmetrisch $[\psi_E(-x) = -\psi_E(x)]$

(d.h. „Eigenfunktion des Paritätsoperators", $\hat{P}\psi_E(x) := \psi_E(-x)$)

$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsdichte ist symmetrisch :
$$|\psi_E(-x)|^2 = |\psi_E(x)|^2 .$$

Betrachten wir jetzt ein Potential, welches periodisch ist :
$$V(x+na) := V(x) \qquad \forall x, \forall n \in \mathbb{Z} .$$

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 ?

<u>Ansatz:</u> $\psi_E(x+na) = e^{if(na)}\,\psi_E(x)$.

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

(ii) $\psi_E(x+a) = e^{if(a)}\,\psi_E(x) \qquad | \; x \to x+a$

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

Aber auch:

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

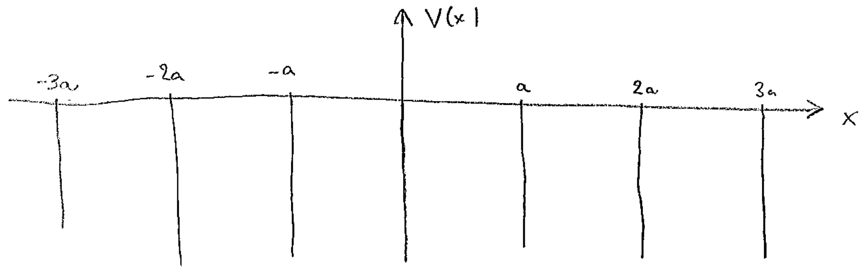
$\Rightarrow f(2a) = 2f(a) \quad ; \quad f(na) = n f(a)$

$\Rightarrow f$ ist linear $\Rightarrow f(na) =: K\cdot na, \quad K \in \mathbb{R}$.

<u>Fazit:</u> $$\psi_E(x+na) = e^{iKna}\,\psi_E(x)$$ „Blochscher Satz"

Um den Wert von K zu bestimmen, müssen wir $V(x)$ genauer spezifizieren. Ein einfaches Beispiel:

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



„ein Kammpotential"

<u>$0 < x < a$</u>

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

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

$$\psi_E = A\cdot e^{ik_0x} + B e^{-ik_0x}$$

<u>$a < x < 2a$</u>

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

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

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

<u>Anschlussbedingungen</u>

* Seite 22: keine δ' in $V(x)$ $\Rightarrow$ ψ_E ist stetig!
* Aber: es gibt δ in $V(x)$ $\Rightarrow$ ψ_E' ist <u>nicht</u> stetig!

---

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

Wie gross ist die Unstetigkeit von Ψ_E'? In der Nähe von $x=a$:

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

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

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

Alles zusammen:

$$\begin{cases} \Psi_E(a^-) = \Psi_E(a^+) & \Leftrightarrow \quad A e^{ik_0a} + B e^{-ik_0a} = e^{iKa}[A+B] \\ \Psi_E'(a^-) = \Psi_E'(a^+) + \frac{2m\Omega}{\hbar^2}\Psi_E(a) & \Leftrightarrow \quad ik_0\left[A e^{ik_0a} - B e^{-ik_0a}\right] = ik_0 e^{iKa}[A-B] + \frac{2m\Omega}{\hbar^2} e^{iKa}[A+B] \end{cases}$$

$\Leftrightarrow$

$$\begin{pmatrix} e^{ik_0a} - e^{iKa} & e^{-ik_0a} - e^{iKa} \\ ik_0\left(e^{ik_0a} - e^{iKa}\right) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2}e^{iKa} & -ik_0\left(e^{-ik_0a} - e^{iKa}\right) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2}e^{iKa} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Es gibt eine nicht-triviale Lösung genau dann, wenn $\mathrm{Det}\begin{pmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} = 0$.

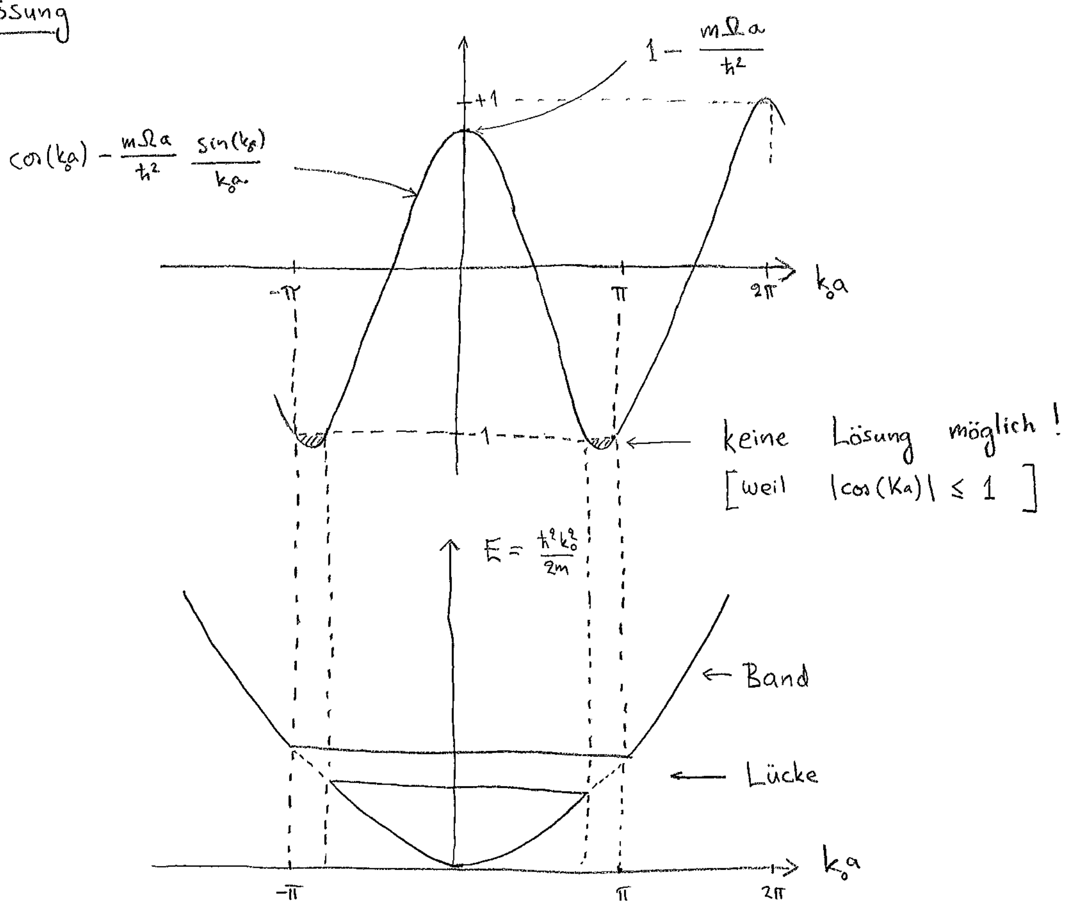
$$\Leftrightarrow \quad -ik_0\left(1 - e^{ik_0a}e^{iKa} - e^{-ik_0a}e^{iKa} + e^{2iKa}\right) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2}\left(e^{ik_0a}e^{iKa} - e^{2iKa}\right)$$
$$-ik_0\left(1 - e^{ik_0a}e^{iKa} - e^{-ik_0a}e^{iKa} + e^{2iKa}\right) + \frac{2m\Omega}{\hbar^2}\left(e^{-ik_0a}e^{iKa} - e^{2iKa}\right) = 0 \qquad \Big|\cdot e^{-iKa}$$

$$-2ik_0\left(e^{iKa} + e^{-iKa} - e^{ik_0a} - e^{-ik_0a}\right) - \frac{2m\Omega}{\hbar^2}\left(e^{ik_0a} - e^{-ik_0a}\right) = 0 \qquad \Big|\cdot\frac{1}{4i}$$

$$-k_0\left(\frac{e^{iKa} + e^{-iKa}}{2} - \frac{e^{ik_0a} + e^{-ik_0a}}{2}\right) - \frac{m\Omega}{\hbar^2}\left(\frac{e^{ik_0a} - e^{-ik_0a}}{2i}\right) = 0 \qquad \Big|\cdot\frac{-1}{k_0}$$

$$\cos(Ka) = \cos(k_0a) - \frac{m\Omega}{\hbar^2 k_0}\sin(k_0a)$$

Graphische Lösung



Zusammenfassung:

* 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 im gleichen Zustand) ergibt sich:
  - Band voll $\Rightarrow$ ein kleiner Energiestoss ändert nichts
    $\Rightarrow$ Isolator.
  - Band halbvoll $\Rightarrow$ Leiter.
  - Band voll aber Lücke klein $\Rightarrow$ Halbleiter.

Man könnte also sagen, dass die „Physik der kondensierten Materie" sich auf dem betrachteten Beispiel basiert.