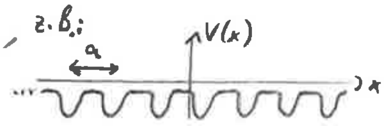
2.2 1D periodisches Potential [Cohen-Tannoudji, § 3.19; Griffiths § 5.3.2]

phys. Motivation: Kraft auf e^- im Kristallgitter, z.B.:



$V(x+a) = V(x)$, $a>0$ heißt "Gitterkonstante"

es gilt garantiert $|\psi_E(x+a)|^2 = |\psi_E(x)|^2$

aber für ψ_E selbst gilt $\psi_E(x+a) = e^{ika}\psi_E(x)$ ← $k\in\mathbb{R}$ "Bloch'scher Satz"

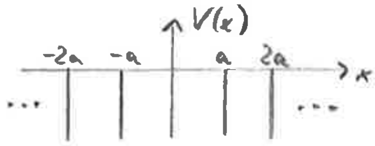
Beweis:
- Ansatz $\psi_E(x+a) = e^{if(a)}\psi_E(x)$
- $\Rightarrow |\psi_E(x+a)|^2 = e^{i(f(a)-f^*(a))}|\psi_E(x)|^2 \Rightarrow f\in\mathbb{R}$
- $\psi_E(x+2a) = e^{if(2a)}\psi_E(x)$

  aber auch $\overset{!}{=} e^{if(a)}\psi_E(x+a) = e^{2if(a)}\psi_E(x)$

  $\Rightarrow f(2a) = 2f(a)$, $f(na) = n f(a)$, f ist linear , $f(a) = \overset{k\in\mathbb{R}}{k}a$ ∎

einfachstes (?) Bsp: "Dirac-Kamm"

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



((nicht sehr realistisch für e^- im Kristall; besser ⊔⊓⊔⊓ ? wollen hier Auswirkungen der periodischen Struktur untersuchen))

$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V\right]\psi_E = E\psi_E$

Schröd.-Glg lösen! Strategie wie gehabt: Stücke + Anschluss

wir sind hier an Lsn. mit $\boxed{E\geq 0}$ interessiert, $E \equiv \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$

(($E<0$ gibt ein diskretes Lösungsspektrum; "lokalisierte e^-"))

s. z.B. Ü7

$\underline{0<x<a}$ $\quad \psi_E'' = -k_0^2\psi_E$, Lsg $\psi_E(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}$

$\underline{-a<x<0}$ $\quad \psi_E(x) = e^{-ika}\left[Ae^{ik_0(x+a)} + Be^{-ik_0(x+a)}\right]$ (wg. Bloch rückwärts)

Anschluss (vgl. §2.1, S.18)

- kein δ' in V $\Rightarrow$ ψ_E ist stetig!
- hier gibt es aber δ in V $\Rightarrow$ ψ_E' ist nicht stetig

  (→ ψ_E darf Knicke haben)

→ also z.B. bei $x=0$: $\psi_E(0^-) = \psi_E(0^+)$ (∗)

- Größe der Unstetigkeit in ψ_E' ?

  → SG. überintegrieren! (wg. Delta...) z.B. $(\varepsilon \to 0^+)$

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \cdot \left\{ \psi_E''(x) = -k_0^2\, \psi_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{V(x)}\, \psi_E(x) \right\}$$

↳ nur $-\Omega\delta(x)$ trägt in $[-\varepsilon,\varepsilon]$ bei

$$\Rightarrow \psi_E'(\varepsilon) - \psi_E'(-\varepsilon) = -k_0^2 \cdot 0 - \frac{2m\Omega}{\hbar^2}\psi_E(0) \qquad (**)$$

wir bekommen also die Anschlussbedingungen (bei $x=0$)

$$(*) \Rightarrow e^{-ika}\left[A e^{ik_0a} + B e^{-ik_0a}\right] = A + B$$

$$(**) \Rightarrow ik_0[A-B] - e^{-ika}\, ik_0\left[A e^{ik_0a} - B e^{-ik_0a}\right] = -\underbrace{\boxed{\frac{2m\Omega}{\hbar^2}}}_{\equiv 2k_0c}(A+B)$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} e^{-i(k-k_0)a} - 1 & e^{-i(k+k_0)a} - 1 \\ \frac{2c}{i} + 1 - e^{-i(k-k_0)a} & \frac{2c}{i} - 1 + e^{-i(k+k_0)a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

es gilt also eine nicht-triviale Lsg $\Leftrightarrow$ Det$(::) = 0$ ist;

$$0 \overset{!}{=} \mathrm{Det}\begin{pmatrix} x & y \\ \frac{2c}{i} - x & \frac{2c}{i} + y \end{pmatrix} = x\left(\frac{2c}{i} + y\right) - y\left(\frac{2c}{i} - x\right) = \frac{2c}{i}(x-y) + 2xy$$

$$x - y = e^{-i(k-k_0)a} - e^{-i(k+k_0)a} = e^{-ika}\left(e^{ik_0a} - e^{-ik_0a}\right) = e^{-ika}\, 2i\sin(k_0a)$$

$$xy = e^{-2ika} - e^{-ika}e^{ik_0a} - e^{-ika}e^{-ik_0a} + 1$$

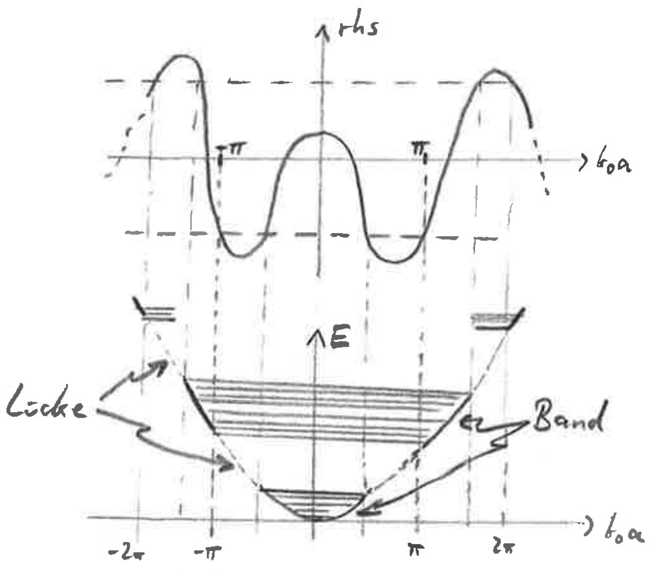
$$= e^{-ika}\left[e^{-ika} - e^{ik_0a} - e^{-ik_0a} + e^{ika}\right] = e^{-ika}\left[2\cos(ka) - 2\cos(k_0a)\right]$$

$$= e^{-ika}\, 4\left[c\sin(k_0a) + \cos(ka) - \cos(k_0a)\right]$$

→ fixiert also $k(E)$ in ψ_E: $\left(\left(E = \frac{\hbar^2k_0^2}{2m}, \text{s.o.}\right)\right)$

$$\cos(ka) = \cos(k_0a) - \frac{m\Omega a}{\hbar^2}\,\frac{\sin(k_0a)}{k_0a}$$

hat nicht immer eine Lsg: lhs $\in [-1,1]$



- kontinuierliches Spektrum für $E>0$, aber mit Bandstruktur
- Physik: e^- im Kristallgitter, Paulíprinzip (keine e^- im selben Zust.)

  Band halbvoll → Leiter

  Band voll → Isolator

  Band voll, Lücke klein → Halbleiter