Bloch Theorem

Präsentation für die Lehrveranstaltung „Einführung in die Festkörperphysik“

von

Sebastian Nau (0530660)
Thomas Gruber (0530787)

Inhalt

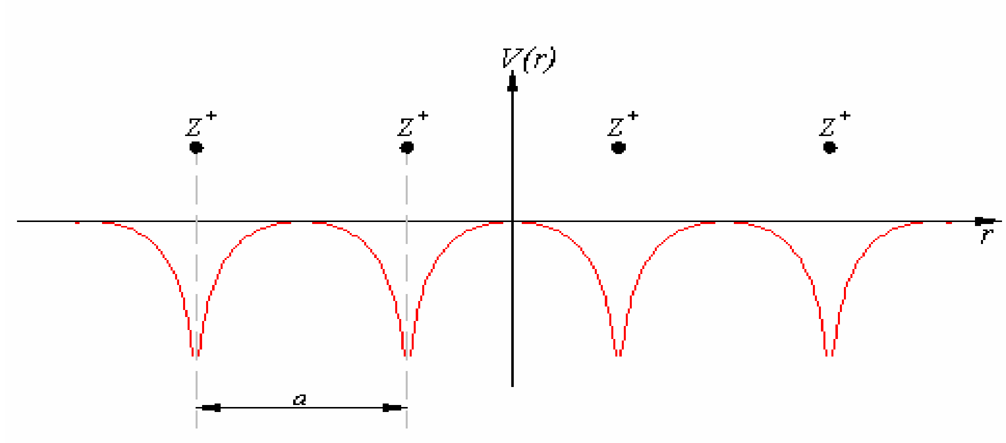
- Felix Bloch
- Aussagen des Bloch Theorems
- Eigenschaften von Bloch-Zuständen
- Beweis mittels Translationsoperator
- Beweis über die Hauptgleichungen

Felix Bloch (1905-1983)

- 1905 geboren in Zürich/Schweiz
- Doktorarbeit über das Verhalten von Elektronen in Kristallgittern
- Assistent von Heißenberg und Pauli
- **Begründer der Festkörperphysik**
- Generaldirektor des CERN
- Physik Nobelpreis 1952 für die Entdeckung des NMR

Aussagen des Bloch Theorems (1)

- Ist eine Erweiterung des „Freien Elektronen Modells“



Aussagen des Bloch Theorems (2)

- Die Schrödingergleichung für ein solches Problem lautet:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$$(-\frac{\hbar}{2m}\Delta + V(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

- mit dem periodischen Potential $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$
- und $R = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$
- Alle Punkte mit dem Abstand R sind physikalisch gleichwertig
- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen ist dort gleich

$$|\psi(\vec{r} + \vec{R})|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$$

Aussagen des Bloch Theorems (3)

- Die Wellenfunktion kann sich nur um einen Phasenfaktor unterscheiden

$$\psi(\vec{r}+\vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}\psi(\vec{r})$$

- Es genügt also, die Wellenfunktion in einer Einheitszelle zu bestimmen

- Wellenfunktion besitzt die Form: $\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}u_k(\vec{r})$
- mit $u_k(\vec{r}+\vec{R}) = u_k(\vec{r})$

- Die Eigenfunktionen der Wellengleichung für ein periodisches Potential sind das Produkt aus einer Ebenen Welle $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ und einer Funktion $u_k(\vec{r})$

Eigenschaften von Bloch Zuständen (1)

- Periodizität im k-Raum: $\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$

- Periodizität der Energie im k-Raum: $\epsilon(\vec{k}+\vec{G}) = \epsilon(\vec{k})$

- Bloch-Zustände sind keine Eigenfunktionen zum Impuls-Operator: $\hbar\vec{k} \neq \vec{p}$

Eigenschaften von Bloch Zuständen (2)

- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons besitzt nicht mehr überall im Kristall den gleichen Wert

$$\psi(\vec{k},\vec{r}+\vec{T}) = u(\vec{k},\vec{r}+\vec{T})e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{T})}$$

$$= u(\vec{k},\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}e^{i\vec{k}\vec{T}}$$

$$= \psi(\vec{k},\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{T}}$$

Beweis mittels Translastionsoperator (1)

- Hamiltonoperator H invariant gegenüber Translation

$$H(r+R) = H(r)$$

- wendet man den Translationsoperator

$$T_R \psi(r) = \psi(r+R)$$

- Auf die stationäre Schrödingergleichung an, ergibt sich

$$T_R H \psi(r) = H(r+R)\psi(r+R) = H(r)\psi(r+R) = H(r) T_R \psi(r)$$

- Daraus folgt offenbar

$$T_R H = H T_R \text{ oder } [T_R, H] = 0$$

Beweis mittels Translastionsoperator (2)

- H und T vertauschen, und besitzen daher ein gemeinsames Eigenwertspektrum

- Es stellt also sich die Frage nach den Eigenwerten λ

$$T\psi(r) = \lambda_T \psi(r)$$

- Diese Gleichung muss für hintereinander ausgeführte Translationen gelten:

$$T_1 T_2 \psi(r) = \lambda_{T_1} \lambda_{T_2} \psi(r) = \lambda_{T_1+T_2} \psi(r)$$

- Dies kann nur erfüllt werden wenn der Eigenwert den Betrag 1 aufweist, also e^{ikr} ist

Beweis mittels Translastionsoperator (3)

- **Es gilt also**

$$\psi(r+R) = T_R\psi(r) = e^{ikr}\psi(r)$$

- **womit das Bloch Theorem bewiesen ist**

Beweis über die Hauptgleichungen (1)

- Das Potential V(r) kann als Fourier Reihe nach den reziproken Gittervektoren G entwickelt werden

$$V(x) = \sum_G U_G e^{iGx}$$

- Wellenfunktion wird nach ebenen Wellen entwickelt

$$\psi(\vec{r}) = \sum_k C(k) e^{ikx}$$

- Setzt man beides in die Schrödinger Gleichung ein, erhält man

$$\sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C(k) e^{ikx} + \sum_{k,G} U_G e^{iGx} C(k) e^{ikx} = E \sum_k C(k) e^{ikx}$$

$$\sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C(k) e^{ikx} + \sum_{k',G} U_G C(k') e^{i(G+k')x} = E \sum_k C(k) e^{ikx}$$

Beweis über die Hauptgleichungen (2)

- Umschreiben von k‘+G in k

$$\sum_k e^{ikx}[(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E)C(k) + \sum_G U_G C_{k-G}] = 0$$

- Klammerausdruck muss 0 sein

$$(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E)C(k) + \sum_G U_G C_{k-G} = 0$$

- Verwendet man diese Gleichungssystem zur bestimmung der Konstanten C, so erhält man die Wellenfunktion:

$$\psi_k(x) = \sum_G C(k-G) e^{i(k-G)x}$$

Beweis über die Hauptgleichungen (3)

- **Diese kann umgeformt werden in**

$$\psi_k(x) = (\sum_G C(k-G)e^{-iGx})e^{ikx} = e^{ikx}u_k(x)$$

- **Mit der Definition, dass**

$$u_k(x) \equiv \sum_G C(k-G)e^{-iGx}$$

- **Die Invarianz von** $u_k(x)$ **lässt sich zeigen.**

$$u_k(x+T) = \sum_G C(k-G)e^{-iG(x+T} = e^{-iGT}[\sum_G C(k-G)e^{-iGx}] = e^{iGT}u_k(x)$$

- **Da** $e^{iGT} = 1$ **ist** $u_k(x)$ **periodisch und das Bloch Theorem bewiesen**