Bloch Theorem

Advanced

- Für jedes periodische Potential läßt sich in voller Allgemeinheit zeigen, daß jede Lösung $\psi(\underline{k},\underline{r})$ der Schrödingergleichung folgender Bedingung genügen muß

$$\psi(\underline{k}, \underline{r}) \;=\; u(\underline{k}, \underline{r}) \cdot e^{\,i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}}$$

  - Wir haben also *ebene Wellen* (die Lösung für das freie Elektronengas), die mit einer Funktion $u(\underline{k}, \underline{r})$ amplitudenmoduliert sind.

- Man kann das auch so schreiben

$$\psi_k(\underline{r}) \;=\; u_k(\underline{r}) \cdot e^{\,i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}}$$

  - Damit betonen wir, daß der jetzt als Index verwendete Wellenvektor $\underline{k}$ einfach den Zustand numeriert, er ist die "Quantenzahl" des Zustands. Die Lesart ist dann: Die Wellenfunktion des Elektrons im Zustand k ist eine ebene Welle $\exp(i\underline{kr})$ moduliert mit einer für den Zustand charakteristischen Funktion $u_k(\underline{r})$ - kurz eine **Blochwelle**

- Die Funktion $u_k(\underline{r})$ muß dabei einer harten Bedingung genügen:

$$u(\underline{k}, \underline{r}) \;= u(\underline{k}, \underline{r} \;+\; \underline{T})$$

  - $\underline{T}$ ist dabei ein Translationsvektor des Gitters; $u(\underline{k}, \underline{r})$ muß damit *gitterperiodisch* sein.

- Diese Beziehungen sind Varianten des "*Bloch Theorems*" dessen Bedeutung kaum überschätzt werden kann. Wir werden uns nun einige aus dem Bloch Theorem ableitbare Konsequenzen anschauen.
  - Zunächst ist klar, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines (freien) Elektrons jetzt nicht mehr notwendigerweise überall im Ortsraum denselben Wert hat. Allerdings ist das Elektron nach wie vor über den ganzen Kristall verschmiert, denn ψ ist bis auf einen Phasenfaktor $\exp(i\underline{k}\underline{T})$, der bei der Betragsquadratbildung herausfällt, gitterperiodisch. Das ist leicht zu zeigen:

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

  - Wir haben also grundsätzlich *Periodizitäten der Lösungen im Ortsraum*.

- Wir haben zu jedem periodischen Gitter im Ortsraum aber auch ein periodisches Gitter im reziproken Raum, das *reziproke Gitter*. Das reziproke Gitter ist, wie wir gesehen haben, ein Raum in dem sich die Wellenvektoren definieren lassen.
  - Wir können daher erwarten, daß die allgemeinen Lösungen der Schrödingergleichung auch im reziproken Gitter Peridozitäten zeigt.
  - Das tut sie auch, es gilt:

$$\psi(\underline{k} + \underline{G}, \underline{r}\,) \;=\; \psi(\underline{k}\,, \underline{r}\,)$$

  - Dabei ist $\underline{G}$ ein Translationsvektor des *reziproken* Gitters, d.h. ein reziproker Gittervektor.

- Diese Beziehung läßt sich leicht beweisen; wir betrachten dazu das Verhalten von $\psi(\underline{k} + \underline{G}, \underline{r} + \underline{a})$. Wir haben (unter Verwendung der oben abgeleiteten Beziehung)

$$\psi(\underline{k} + \underline{G}, \underline{r} + \underline{T}) \;=\; \psi(\underline{k} + \underline{G}, \underline{r}\,) \cdot \exp\;[i \cdot (\underline{k} + \underline{G}\,) \cdot \underline{T}]$$

  - Da $\underline{G}$ ein reziproker Gittervektor ist und $\underline{T}$ ein Translationsvektor, gilt

$$e^{\,i \cdot \underline{G} \cdot \underline{T}} \;=\; e^{\,i \cdot 2\pi \cdot n} = 1$$

  - Damit erhalten wir

$$\psi(\underline{\boldsymbol{k}} + \underline{\mathbf{G}}, \underline{\boldsymbol{r}} + \underline{\boldsymbol{T}}) = \psi(\underline{\boldsymbol{k}} + \underline{\mathbf{G}}, \underline{\boldsymbol{r}}) \cdot \exp[\mathrm{i} \cdot \underline{\boldsymbol{k}} \cdot \underline{\boldsymbol{T}}]$$

- Diese Gleichung ist aber nur mit der bereits abgeleiten Gleichung für reine Translationen im Ortsraum vereinbar, wenn immer gilt

$$\psi(\underline{\boldsymbol{k}} + \underline{\mathbf{G}}, \underline{\boldsymbol{r}}) = \psi(\underline{\boldsymbol{k}}, \underline{\boldsymbol{r}}) \qquad \textit{q.e.d.}$$

- Mit dieser Beziehung lassen sich alle Wellenfunktionen in der ersten Brillouinzone darstellen. Wir müssen ja nur solange reziproke Gittervettoren von ***k*** abziehen, bis ***k*** kleiner wird als der kleinste reziproke Gittervektor - damit ist man in der **1.** Brillouinzone. Man nennt das - wir wissen es schon - eine **reduzierte Darstellung** mit **reduzierte Wellenvektoren**. Damit ist unser "zeichentechnischer Trick" sogar theoretisch wohlbegründet.
- Aus der Gleichheit der Wellenfunktion folgt aber *nicht* die Gleichheit der Energie. Die durch die Wellenfunktion beschriebenen Zustände sind jetzt *entartet*, d.h. zum gleichen reduzierten Wellenvektor gibt es mehrere (∞ viele) Energieeigenwerte - jeweils einen für jede mögliche Kombination ***k*** + ***G***.

Wer etwas tiefer in die Materie eindringen möchte, kann Links zum Hyperskript "Semiconductors" betätigen; es gibt:

- Einfache Beweise des Bloch Theorems.
- Vollständiger Beweis des Bloch Theorems.
- Mehr zum Bloch Theorem.