

## Lösung zur Übung 2.3-1

### Lösung der Schrödingergleichung für einen Kristall in der Approximation des "freien Elektronengases"

1. Zeige, dass die allgemeine eindimensionale Lösung (unter Benutzung der [Normierungsbedingung](#)) die folgende Form hat:

Wir starten mit zweimaliger Differentiation der zu verifizierenden Lösung in einer Dimension. Wir erhalten

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{L}\right)^{1/2} \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$
$$\frac{d\psi}{dx} = \left(\frac{1}{L}\right)^{1/2} \cdot i \cdot k \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$
$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \left(\frac{1}{L}\right)^{1/2} \cdot (-1) \cdot k^2 \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$

Eingesetzt in die Schrödingergleichung und mit  $(1/L)^{1/2} = L^*$  (um Schreibarbeit zu sparen), ergibt sich im Gebiet mit  $U = 0 \text{ eV}$

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot L^* \cdot k^2 \cdot \exp(i \cdot k \cdot x) = E \cdot L^* \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)$$

Unser Lösungsansatz ist also dann, und *nur* dann eine Lösung, falls folgende Bedingung erfüllt ist:

$$E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m_e}$$

Das ist die postulierte Gleichung für die Gesamtenergie; der erste Teil der Aufgabe ist damit erledigt.

Die Normierungsbedingung schenken wir uns hier; sie kommt gleich noch dreidimensional.

2. Zeige, daß wir damit auch die *drei*dimensionale Lösung für einen Kristall der Ausdehnung  $L_x = L_y = L_z = L$  haben (unter Benutzung der dreidimensionalen [Normierungsbedingung](#)), in der Form

Die dreidimensionale Schrödingergleichung kann wegen des gegebenen Potentials durch einen Produktansatz der Form  $\psi(\underline{r}) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$  gelöst werden.

Was für die  $x$ -Richtung galt, gilt auch für die  $y$ - und  $z$ -Richtung, also für die Komponenten eines Ortsvektors  $\underline{r} = (x, y, z)$  und eines Vektors  $\underline{k} = (k_x, k_y, k_z)$ , der notwendigerweise die Dimension  $[1/\text{cm}]$  hat und den wir **Wellenvektor** nennen.

Wir haben also

$$\psi(\underline{r}) = L^{**} \cdot \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r})$$

Der Vorfaktor  $L^{**}$  muss jetzt aus der *drei*dimensionalen Normierungsbedingung bestimmt werden:

$$\int_0^L \int_0^L \int_0^L (L^{**})^2 \cdot \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{x}) \cdot \exp(-i \cdot \underline{k} \cdot \underline{x}) \cdot dx dy dz \stackrel{!}{=} 1 = (L^{**})^2 \cdot \int_0^L \int_0^L \int_0^L dx dy dz$$

- Das Integral ist natürlich schlicht =  $L^3$ ; wir erhalten

$$L^3 \cdot (L^{**})^2 = 1 \quad L^{**} = \left( \frac{1}{L} \right)^{3/2} \quad \text{q.e.d.}$$

Wir sehen auch, wo die lästigen Potenzen  $3/2$  etc. herkommen, die fast jede Formel der Quantentheorie verunstalten:

- Die **2** kommt von der immer erforderlichen Quadrierung der Vorfaktoren bei der Betragsquadratbildung der Wellenfunktion, und die **3** oder was immer von den Dimensionen des betrachteten Problems.
- Lästig, unschön, zu Fehlern verführend - aber eigentlich trivial.

3. Zeige, daß die unten angeführten Gleichungen für den **Wellenvektor  $k$**  sich aus der (periodischen) Randbedingung  $\psi(\underline{r} + L) = \psi(\underline{r})$  ergibt.

Für den dritten Teil müssen wir die Randbedingungen in die Lösung einsetzen, d.h.

$$\begin{aligned} L^* \cdot \exp(i \cdot k_x \cdot x) &= L^* \cdot \exp[i \cdot k_x \cdot (x + L)] \\ &= L^* \cdot \exp(i \cdot k_x \cdot x) \cdot \exp(i \cdot k_x \cdot L) \end{aligned}$$

Die Gleichungen für  $k_y$  und  $k_z$  sind natürlich entsprechend. Diese Gleichungen können nur befriedigt werden, falls gilt

$$\begin{aligned} L^* \cdot \exp(i \cdot k_{x, y, z} \cdot L) &= 1 \\ k_{x, y, z} &= n_{x, y, z} \cdot \frac{2\pi}{L} \\ n_{x, y, z} &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \end{aligned}$$

Die **Quantenzahlen**, die unsere Lösungsmannigfaltigkeit sortieren, kommen also aus den Randbedingungen!

4. Jetzt zu den schwierigen Fragen:

Was bedeutet diese Lösung für Elektronen im "Kristall" anschaulich?

Ein Ausdruck der Form  $A = A_0 \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$  beschreibt grundsätzlich eine ebene Welle, die in  $\mathbf{k}$ -Richtung mit der Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$ . Damit die Welle "läuft", multipliziert man noch mit dem **Phasenfaktor**  $\exp(i\omega t)$ . Unbedingt nachlesen!

- Was "welt" ist  $\psi$ , die dimensionslose Wellenfunktion. Was das bedeutet erschließt sich erst, wenn man aus der Wellenfunktion meßbare Parameter ableitet.
- Die möglichen Richtungen im Kristall, in denen es "wellen" darf, sind durch die gequantelten Werte für  $\mathbf{k}$  vorgegeben.

Wo befindet sich das Elektron eigentlich?

- Das ist einfach: Die **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $W$**  ist

$$W = \psi(\underline{r}) \cdot \psi^*(\underline{r}) = \left( \frac{1}{L} \right)^3 \cdot \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}) \cdot \exp(-i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}) = \left( \frac{1}{L} \right)^3$$

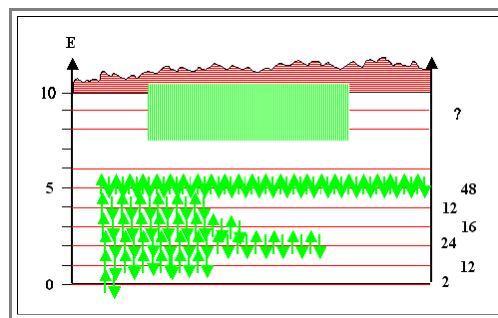
- Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron irgendwo im Kristall zu finden ist überall gleich groß! Es "gehört" damit dem ganzen Kristall und hat sich "gleichmäßig verteilt".

Wo sind die Energieniveaus in diesem rechteckigen Potentialtopf? Die ersten **10** oder so kann man ja leicht ausrechnen und einzeichnen.

- Das macht jetzt Arbeit. Am besten wir machen eine Tabelle und schauen mal, was wir für größer werdende Quantenzahlen  $n_x, y, z$  so bekommen:

Quantenzustand			Energie ( $\times$ Konstante)	Zustände		Zahl der $e^-$ pro E
$n_x$	$n_y$	$n_z$				
0	0	0	0		1	2
$\pm 1$ 0 0	0 $\pm 1$ 0	0 0 $\pm 1$	1	2 2 2	6	12
$\pm 1$ $\pm 1$ 0	$\pm 1$ 0 $\pm 1$	0 $\pm 1$ $\pm 1$	2	4 4 4	12	24
$\pm 1$	$\pm 1$	$\pm 1$	3		8	16
$\pm 2$ 0 0	0 $\pm 2$ 0	0 0 $\pm 2$	4	2 2 2	6	12
Weiter ohne Details						
2	1	0	5			48
2	1	1	6			?
2	2	0	8			?
2	2	1	9			?
3	0	0				
und so <i>wie</i> weiter?						

- Damit können wir die Energieniveaus und die Maximalzahl an Elektronen pro Niveau (= Entartungsgrad) für kleine Quantenzahlen mal einzeichnen:



- Schon merkwürdig. Ein einfach erkennbares Bildungsgesetz gibt es nicht - es fehlt z. B. das Energieniveau bei "7"; vom Entartungsgrad mal ganz zu schweigen. *Daran werden wir noch arbeiten müssen!*

Was passiert, falls wir mehr als ein Elektron betrachten?

- Immer dieselbe Leier. Wir betrachten immer nur das "letzte", alle anderen schlagen wir gemittelt dem Grundpotential zu. Damit bleibt die Struktur der Lösung erhalten, während Zahlenwerte sich vielleicht ändern.
- Wir haben weiterhin diskrete Niveaus mit irgendeinem Entartungsgrad, und diese Niveaus füllen wir "von unten her kommend" mit Elektronen auf, bis das letzte untergebracht ist.

Falls es jemand nicht gemerkt haben sollte: Wir haben hier erstmalig in primitiver Form die bereits postulierten **Energiebänder** für die bindenden Elektronen im Kristall ausgerechnet!