Bänderberechnung

Andreas Buhr, TU Darmstadt

11. August 2006

1 Einleitung

Zur Berechnung der Bandstruktur in Metallen mit schwachem periodischen Potential ist es üblich, die Schrödingergleichung im Impulsraum zu formulieren und zu lösen. In den üblichen Lehrbüchern wie Ashcroft/Mermin oder Ibach/Lüth wird diese Formulierung im Impulsraum dargestellt als eine Entwicklung in ebenen Wellen im Ortsraum. Dies ist aufwändig und unübersichtlich.

Ich versuche hier eine konsistente Darstellung im Impulsraum von der Herleitung der Schrödingergleichung im Impulsraum zu geben.

2 Vorraussetzungen / Ansatz

Gelöst werden muss die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle \tag{1}$$

Dabei gehe ich von folgenden Vorraussetzungen aus:

- Die Lösungsfunktion $|\phi\rangle$ wird im Impulsraum entwickelt:
$$\langle p|\phi\rangle = c_p \tag{2}$$
- Dem Hamiltonoperator
$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{U} \tag{3}$$
- Die Relation zwischen Impuls- und Ortsraum:
$$\langle x|p\rangle = e^{i\frac{p}{\hbar}x} \tag{4}$$
- Der Vollständigkeitsrelation:
$$\sum_a |a\rangle\langle a| = 1 \tag{5}$$
- Der Potentialfunktion im Ortsraum:
$$\hat{U}|x\rangle = U(x)|x\rangle \tag{6}$$

3 Rechnung

1. $\hat{H}_1|\phi\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1|\phi\rangle &= \frac{\hat{P}^2}{2m}|\phi\rangle && (7)\\ &= \sum_{p_1} \frac{\hat{P}^2}{2m}|p_1\rangle\langle p_1|\phi\rangle && (8)\\ &= \sum_{p_1} \frac{p_1^2}{2m}c_{p_1}|p_1\rangle && (9) \end{aligned}$$

2. $\hat{H}_2|\phi\rangle$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_2|\phi\rangle &= \hat{U}|\phi\rangle && (10)\\
&= \sum_{p_2}\int_x\sum_{p_3}|p_3\rangle\langle p_3|\hat{U}|x\rangle\langle x|p_2\rangle\langle p_2|\phi\rangle && (11)\\
&= \sum_{p_2}\int_x\sum_{p_3}|p_3\rangle\langle p_3|U(x)|x\rangle e^{i\frac{p_2}{\hbar}x}c_{p_2} && (12)\\
&= \sum_{p_2}\int_x\sum_{p_3}|p_3\rangle U(x)e^{-i\frac{p_3}{\hbar}x}e^{i\frac{p_2}{\hbar}x}c_{p_2} && (13)
\end{aligned}$$

Das Integral über x ausführen:

$$\begin{aligned}
&= \sum_{p_2}\int_x\sum_{p_3}|p_3\rangle U(x)e^{i\frac{p_2-p_3}{\hbar}x}c_{p_2} && (14)\\
&= \sum_{p_2}\sum_{p_3}|p_3\rangle U_{p_2-p_3}c_{p_2} && (15)
\end{aligned}$$

mit

$$U_{p_2-p_3} = \int_x U(x)e^{i\frac{p_2-p_3}{\hbar}x} \tag{16}$$

3. $\hat{E}|\phi\rangle$

$$\begin{aligned}
E|\phi\rangle &= \sum_{p_4}E|p_4\rangle\langle p_4|\phi\rangle && (17)\\
&= \sum_{p_4}Ec_{p_4}|p_4\rangle && (18)
\end{aligned}$$

Alles zusammenführen:

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\phi\rangle &= E|\phi\rangle && (19)\\
\Rightarrow \sum_{p_1}\frac{p_1^2}{2m}c_{p_1}|p_1\rangle + \sum_{p_2}\sum_{p_3}c_{p_2}U_{p_2-p_3}|p_3\rangle &= \sum_{p_4}Ec_{p_4}|p_4\rangle && (20)\\
\Rightarrow \sum_{p_1}\frac{p_1^2}{2m}c_{p_1}|p_1\rangle + \sum_{p_2}\sum_{p_3}c_{p_2}U_{p_2-p_3}|p_3\rangle &- \sum_{p_4}Ec_{p_4}|p_4\rangle = 0 && (21)
\end{aligned}$$

Setze $p_1 = p_3 = p_4$:

$$\Rightarrow \sum_{p_1}\frac{p_1^2}{2m}c_{p_1}|p_1\rangle + \sum_{p_2}\sum_{p_1}c_{p_2}U_{p_2-p_1}|p_1\rangle - \sum_{p_1}Ec_{p_1}|p_1\rangle = 0 \tag{22}$$

$$\Rightarrow \sum_{p_1}\left[\frac{p_1^2}{2m}c_{p_1} + \sum_{p_2}c_{p_2}U_{p_2-p_1} - Ec_{p_1}\right]|p_1\rangle = 0 \tag{23}$$

$$\Rightarrow \sum_{p_1}\left[\left(\frac{p_1^2}{2m} - E\right)c_{p_1} + \sum_{p_2}c_{p_2}U_{p_2-p_1}\right]|p_1\rangle = 0 \tag{24}$$

Wegen der Orthogonalität der $|p_1\rangle$ folgt, dass für alle p_1 gelten muss:

$$\left(\frac{p_1^2}{2m} - E\right) c_{p_1} + \sum_{p_2} c_{p_2} U_{p_2 - p_1} = 0 \tag{25}$$

Und zwar für alle p_1 mit den gleichen Entwicklungskoeffizienten c_{p_i}.

4 Randbedingungen

Wegen der periodischen Randbedingungen gelten Einschränkungen für die p_1:

$$\frac{p_x}{\hbar} = \frac{2\pi}{L_x} n \qquad (n : ganzeZahl) \tag{26}$$

Und wegen der Gitterperiodizität des Potentials kann $U_{p_2 - p_1}$ nur dann von null verschieden sein, wenn gilt:

$$\frac{p_2 - p_1}{\hbar} = K \tag{27}$$

wobei K ein Vektor des Reziproken Gitters ist.

Impressum	
Autor:	Andreas Buhr, Karlstraße 18, D-63225 Langen
Satz:	LaTeX
E-Mail	andreas at andreasbuhr.de
Web	www.andreasbuhr.de