15) Teilchen in periodischen Potentialen

15.1 Hamiltonoperatoren, Bloch`sches Theorem

Wir betrachten den Hamiltonoperator

mit einem Potential , das invariant unter den Transformationen einer RG ist, d.h.

Dann kann jedem EZ von ein Vektor aus der BZ zugeordnet werden und wir kennen das Verhalten dieses Zustands unter Translationen

Dies bedeutet insbesondere, dass

Dies ist das bekannte "Bloch-Theorem". Einsetzen von (2) in (1) ergibt

mit

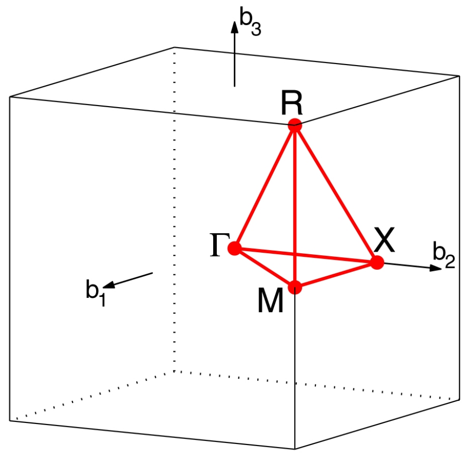
Die SG von ist

mit (wie in 11.2.5 definiert) und .

Da die translationsinvariant sein sollen, sind die Eigenräume von in (*) irreduzible Darstellungsräume von (-Punkt von , da)

15.2 Irreduzibler Teil der BZ

Als "irreduziblen Teil der BZ" bezeichnet man einen minimalen Teil der BZ aus dem alle Punkte der BZ durch Transformationen erzeugt werden können, z.B. in einem kubischen Gitter



CUB path: Γ-X-M-Γ-R-X|M-R

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]

Kennt man die EZ von in der irreduziblen BZ, so kann man alle EZ von einfach durch "Sternoperationen" bestimmen:

Gegeben EZ mit in der irr. BZ und Energien mit

Stern von : mir Repräsentanten

Dann bilden die Zustände

ein irr. DR der Raumgruppe G und damit ein Eigenraum von zur Energie

<u>Beweis</u>:

i) Drehung:

ii) Translation:

15.3 Kompatibilitätsbedingungen

Als Funktion von müssen sich die DR in wohldefinierter Weise entwickeln:

Sei gegeben, dann ist

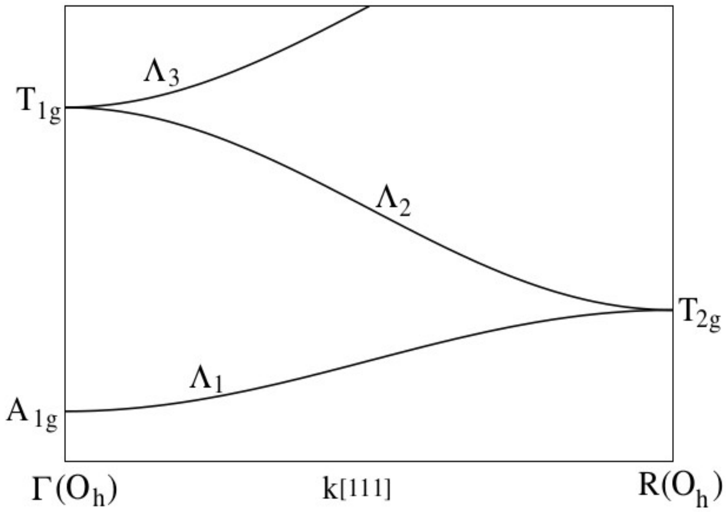
Falls ist eine kleine Störung und es greifen die störungstheoretischen Argumente aus Kap. 8:

Ist die i.i.D. eines EW bei , so ergeben sich die DR von durch Ausreduktion der subduzierten Darstellung

(-> Korrelationstabellen) falls die SG von UG von (SG von) ist.

Also:

Damit eine solche existiert, muss in der subduzierten Darstellung von und auftauchen, z.B. Natrium



15.4 Lösung des Eigenwertproblems mit ebenen Wellen

und sind translationsinvariant, daher

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung:

Angenommen, ist kleine Störung

entartete Störungstheorie für

Eigenfunktionen von :

Beispiel: kubisches Gitter ( )

i)

entarteter Unterraum von : alle mit gleichem Betrag

a)

b)

c)

reduzible DR von

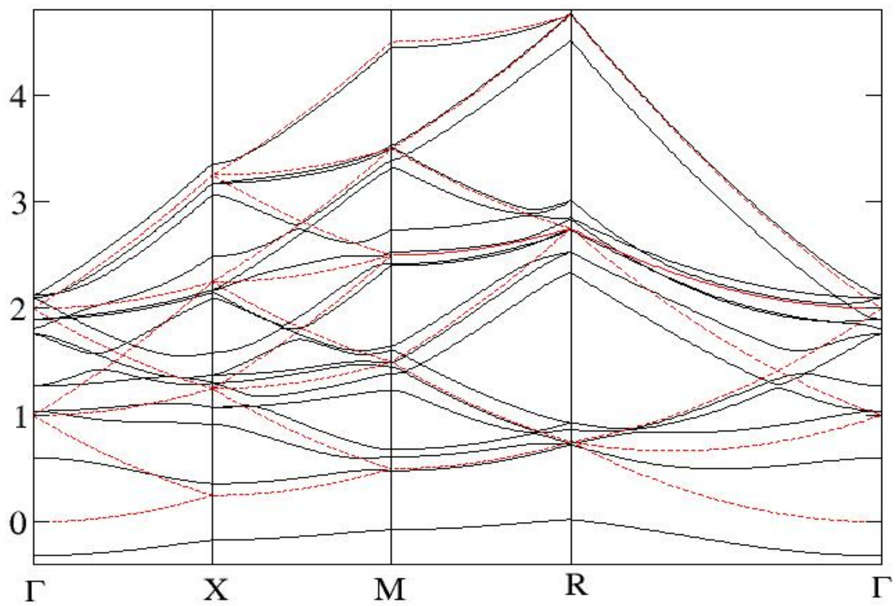
	O_h	E	$6C_4$	$3C_4^2$	$8C_3$	$6C_2'$	I	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	$8S_6$	$6S_4$
Γ_0:	$\vec{G}_0^2 = 0$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_1:	$\vec{G}_0^2 = 1$	6	2	2	0	0	0	4	2	0	0
Γ_2:	$\vec{G}_0^2 = 2$	12	0	0	0	2	0	4	2	0	0

Kap. 8.2.:

ii)

	C_{4v}	E	$2C_4$	C_4^2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_0:	$\vec{G}_0 = (0,0,0)$	1	1	1	1	1
Γ_1:	$\vec{G}_0 = (m,0,0)[m=\pm 1]$	1	1	1	1	1
Γ_2:	$\{\vec{G}_0 = (0,\pm 1,0), \vec{G}_0 = (0,0,\pm 1)\}$	4	0	0	2	0
Γ_3:	$\{\vec{G}_0 = (m,\pm 1,0), \vec{G}_0 = (m,0,\pm 1)\}[m=\pm 1]$	4	0	0	2	0
Γ_4:	$\{\vec{G}_0 = (0,\pm 1,\pm 1)\}$	4	0	0	0	2

Beispiel:


4
3
2
1
0
Γ
X
M
R
Γ