TRANSLATIONS-, HAMILTON-, IMPULS-OPERATOR

- Wie lauten die Beziehungen zwischen den folgenden Operatoren?

$$\hat{T}_{\mathbf{R}} \qquad \text{Translationsoperator}\,,$$
$$\hat{H} = \hat{T}_{kin} + V(\mathbf{r}) \qquad \text{mit} \quad V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r})\,,$$
$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\vec{\nabla} \qquad \text{Impulsoperator}\,.$$

- Grundlage der Bloch'schen Theorie: Vertauschbarkeit der Operatoren $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ und $\hat{H}$:

$$\left[\hat{T}_{\mathbf{R}}, \hat{H}\right] = 0\,.$$

- Die Konsequenz dieser Vertauschbarkeit: die Operatoren $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ und $\hat{H}$ haben dasselbe System von Eigenvektoren bzw. (in der Ortsdarstellung) dieselben Eigenfunktionen vom Bloch-Typus (ν = Bandindex)

$$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r})\,, \qquad (1)$$

wobei $u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r})$ eine gitterperiodische Funktion ist:

$$u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r})\,.$$

- Da der Impulsoperator ein Differentialoperator ist, ist auch die Vertauschbarkeit dieses Operators mit dem Translationsoperator gegeben:

$$\left[\hat{T}_{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}\right] = 0\,.$$

- Es gibt demnach auch gemeinsame Eigenfunktionen von $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ und $\hat{\mathbf{P}}$, die natürlich ebenfalls vom *Bloch-Typ* sein müssen:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

mit

$$w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,.$$

- Es ist nun aus der Quantenmechanik bekannt, daß die Eigenfunktionen des Impulsoperators ebene Wellen sind; daraus folgt, daß auch die Modulationsfunktionen $w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ebene Wellen sein müssen.

  Zusätzlich müssen diese Funktionen gitterperiodisch sein, was unmittelbar zur Form

  $$w_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r}) = w_j(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{K}_j\cdot\mathbf{r}}$$

  führt ($\mathbf{K}_j$ ist der j-te reziproke Gittervektor des Kristallgitters).

- Es ergibt sich somit für die simultanen Eigenfunktionen von $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ und $\hat{\mathbf{P}}$:

  $$\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_j)\cdot\mathbf{r}}\,. \tag{2}$$

- Wendet man auf diese Funktionen den Translationsoperator an, so läßt sich leicht zeigen, daß die $\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r})$ tatsächlich die Eigenwertgleichung von $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ [s. Glg. (2.32) im Skriptum] erfüllen.

  Ebenfalls erhält man ohne Probleme:

  $$-i\hbar\vec{\nabla}\,\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r}) = \hbar(\mathbf{k}+\mathbf{K}_j)\,\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r})\,,$$

  d.h., die Funktionen $\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r})$ sind auch Eigenfunktionen des Impulsoperators mit den Eigenwerten

  $$p_{\mathbf{k},j} = \hbar(\mathbf{k}+\mathbf{K}_j)\,.$$

- Wegen der Gitterperiodizität der Modulationsfunktion $u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r})$ in der Glg. (1) kann diese nach den reziproken Gittervektoren in eine Fourierreihe entwickelt werden:

  $$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\sum_j U_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{K}_j)\,\mathrm{e}^{i\mathbf{K}_j\cdot\mathbf{r}}\,.$$

  Durch Vergleich dieser Entwicklung mit Glg. (2) ergibt sich sofort

  $$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \sum_j U_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{K}_j)\,\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r})\,.$$