

Äquivalente periodische Potentiale

Autor(en): **Steinmann, O.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **30 (1957)**

Heft VI

PDF erstellt am: **22.07.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-112830>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Äquivalente periodische Potentiale*)

von O. Steinmann, Zürich.

(26. VIII. 1957.)

Zusammenfassung. Untersucht wird die Bewegung eines Elektrons in einem eindimensionalen periodischen Potential. Es wird gezeigt, dass durch die effektive Masse das Potential nicht eindeutig bestimmt ist.

1. Einleitung.

In der Festkörperphysik besteht die Tendenz, alle auftretenden Größen durch die effektive Masse auszudrücken, ohne die zugrundeliegenden Wechselwirkungen explizit einzuführen¹⁾. Dadurch erhebt sich die Frage, inwieweit die effektive Masse überhaupt das dynamische Verhalten des untersuchten Systems beschreibt. Diese Frage wird hier für ein Modell untersucht, nämlich für die Bewegung eines Elektrons in einem eindimensionalen periodischen Potential. Es zeigt sich, dass kontinuierliche Scharen von Potentialen existieren, die zu der gleichen Energieabhängigkeit der effektiven Masse $m^*(E)$ führen. Die Kenntnis von $m^*(E)$ liefert also keine vollständige Beschreibung des Systems.

2. Mathematische Hilfsmittel.

Die Schrödingergleichung in einem eindimensionalen periodischen Potential lautet

$$\psi'' + [E - V(x)] \psi = 0, \quad V(x + 1) = V(x). \quad (1)$$

Die benötigten Eigenschaften dieser Gleichung sollen hier ohne Beweise²⁾ zusammengestellt werden:

Zu jedem Wert des Parameters E existieren zwei Lösungen mit der Eigenschaft (Theorem von Floquet)

$$\begin{aligned} u(x + 1) &= e^{ik} u(x), \\ v(x + 1) &= e^{-ik} v(x). \end{aligned} \quad (2)$$

E durchläuft beim Anwachsen abwechselungsweise Intervalle, wo k reell, resp. komplex ist (die erlaubten, resp. verbotenen Bänder der Festkörperphysik).

*) Auszug aus der ETH.-Diplomarbeit des Verfassers.

$u(x)$ und $v(x)$ bilden im allgemeinen ein Fundamentallösungssystem (falls $k \neq n\pi$). Ein anderes Fundamentalsystem $f(x)$, $g(x)$ wird definiert durch die Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} f(0) &= 1 & f'(0) &= 0 \\ g(0) &= 0 & g'(0) &= 1. \end{aligned} \quad (3)$$

Es gilt bis auf konstante Faktoren in u und v :

$$\begin{aligned} u(x) &= g(1)f(x) + [e^{ik} - f(1)]g(x) \\ v(x) &= g(1)f(x) + [e^{-ik} - f(1)]g(x). \end{aligned} \quad (4)$$

Die Funktion $k(E)$ ergibt sich aus

$$2 \cos [k(E)] = f(1, E) + g'(1, E). \quad (5)$$

Wird in (1) $V(x)$ variiert, so gehorcht die Variation $\delta\psi$ von ψ der Gleichung

$$(\delta\psi)'' + (E - V)\delta\psi = \psi\delta V.$$

Für $\psi = f, g$ ergeben sich die Lösungen

$$\delta f(x) = \int_0^x G(x, t) f(t) \delta V(t) dt \quad (6)$$

$$\delta g(x) = \int_0^x G(x, t) g(t) \delta V(t) dt$$

mit

$$G(x, t) = g(x)f(t) - f(x)g(t). \quad (7)$$

3. Äquivalente Potentiale.

Die effektive Masse m^* wird definiert durch

$$\frac{1}{m^*} = \frac{d^2 E}{d k^2} \quad (8)$$

m^* ist eine Funktion von k und damit von E . Aus dieser Funktion lässt sich mit Hilfe der Definition (8) der Zusammenhang $E = E(k)$ ermitteln. Potentiale, für die dieser Zusammenhang der gleiche ist, nennen wir äquivalent.

Wir beweisen nun folgende Aussage:

Satz.

Zu jedem periodischen Potential $V_0(x)$ existieren kontinuierliche Scharen $V(x, s)$, $0 \leq s \leq s_0$, $s_0 > 0$, von äquivalenten periodischen Potentialen mit $V(x, 0) = V_0(x)$.

Zum Beweis dieses Satzes geben wir zuerst eine infinitesimale Variation von V_0 an, die $E(k)$ ungeändert lässt und beweisen dann die Integrierbarkeit dieser Variation.

Sei $\delta = \partial/\partial s$. Nach (5) lautet die Äquivalenzbedingung

$$\delta f(1, E, s) + \delta g'(1, E, s) = 0 \quad (9)$$

für alle E und s . Mit Hilfe von (6) wird das

$$\int_0^1 K(t, E, s) \delta V(t, s) dt = 0, \quad (10)$$

wobei

$$K(t) = g(1) f^2(t) - [f(1) - g'(1)] f(t) g(t) - f'(1) g^2(t), \quad (11)$$

oder mit (4) umgerechnet

$$K(t) = \text{const} \cdot u(t) v(t). \quad (12)$$

Dabei sind noch überall die Argumente E und s hinzuzudenken.

Die Bedingung (10) wird erfüllt durch

$$\delta V(x, s) = K'(x, E_0, s) \equiv K'_0(x, s), \quad (13)$$

wobei E_0 eine beliebige, festgewählte Energie bedeutet. Der Beweis wird geführt nach einem Verfahren von JOST und KOHN³). Seien $y(x)$, $z(x)$ zwei Lösungen von (1), die zu den Energiewerten E resp. E_0 gehören. Dann gilt

$$\int_0^1 y^2(z^2)' dx = \int_0^1 yz(yz)' dx + \int_0^1 yz(yz' - y'z) dx.$$

Das erste Integral ist trivial, das zweite kann mit Hilfe der Schrödingergleichung umgeformt und schliesslich berechnet werden:

$$\begin{aligned} 2 \int_0^1 yz(yz' - y'z) dx &= 2(E - E_0) \int_0^1 \left\{ y(x) z(x) dx \int_0^x y(t) z(t) dt \right\} \\ &= (E - E_0) \left[\int_0^x yz dt \right]^2 \Big|_0^1 \\ &= (E - E_0)^{-1} (yz' - y'z)^2 \Big|_0^1. \end{aligned}$$

Also:

$$2 \int_0^1 y^2(z^2)' dx = (yz)^2 \Big|_0^1 + (E - E_0)^{-1} (yz' - y'z)^2 \Big|_0^1. \quad (14)$$

Setzt man $y = Au + Bv$, $z = Cu_0 + Dv_0$, so erhält man durch Koeffizientenvergleich und unter Berücksichtigung von (2) schliesslich

$$\int_0^1 u v (u_0 v_0)' dx = \text{const} \int_0^1 K K_0' dx = 0.$$

Damit ist die Behauptung (13) bewiesen, wenigstens für den Fall $E \neq E_0$. Für $E = E_0$ ist der Beweis aber trivial:

$$2 \int_0^1 K_0 K_0' dx = K_0^2 \Big|_0^1 = 0,$$

da K_0 nach (12) periodisch ist.

Aus (13) lässt sich nun durch Integration eine Schar der im Satz angegebenen Art gewinnen. Für $E = E_0$ muss gelten:

$$\delta V(x, s) = K'(x, s)$$

$$f''(x, s) + E f(x, s) = V(x, s) f(x, s) \quad (15)$$

$$g''(x, s) + E g(x, s) = V(x, s) g(x, s)$$

mit den Anfangsbedingungen (3) und

$$V(x, 0) = V_0(x), \quad f(x, 0) = f_0(x), \quad g(x, 0) = g_0(x). \quad (16)$$

Dabei bedeutet $\delta = \partial/\partial s$, $' = \partial/\partial x$. V_0 , f_0 , g_0 sind das Ausgangspotential und die zugehörigen Lösungen der Schrödingergleichung. Aus dem System (13) lässt sich V eliminieren mit Hilfe der Beziehungen (6). Es ergibt sich das neue System.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, s)}{\partial s} &= \int_0^x G(x, t; s) f(t, s) K'(t, s) dt \\ \frac{\partial g(x, s)}{\partial s} &= \int_0^x G(x, t; s) g(t, s) K'(t, s) dt. \end{aligned} \quad (17)$$

Zur Lösung dieser Gleichungen machen wir den Reihenansatz

$$f(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(x) s^n, \quad g(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(x) s^n. \quad (18)$$

Durch Einsetzen in die Definitionen (7) und (11) erhält man die weiteren Reihen

$$G(x, t; s) = \sum_{n=0}^{\infty} G_n(x, t) s^n, \quad K(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} K_n(x) s^n. \quad (19)$$

Einsetzen in (17) liefert durch Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} (n+1) f_{n+1} &= \int_0^x \sum_{i+j+h=n} G_i f_j K'_h dt \\ (n+1) g_{n+1} &= \int_0^x \sum_{i+j+h=n} G_i g_j K'_h dt. \end{aligned} \quad (20)$$

Da G_n, K_n bestimmt sind durch die f_i, g_i mit $i \leq n$, treten rechts nur die f_i, g_i mit $i \leq n$ auf. (20) erlaubt also die rekursive Bestimmung aller f_n, g_n . (f_0, g_0 sind bekannt gemäss (16).)

Für $0 \leq x \leq 1$ konvergiert das Verfahren in einem endlichen s -Intervall $|s| < s_0$ (Beweis siehe Abschnitt 4). Aus den so ermittelten f, g erhält man schliesslich das gesuchte Potential

$$V(x, s) = \frac{f''(x, s)}{f(x, s)} + E_0 = \frac{g''(x, s)}{g(x, s)} + E_0 = \int_0^s K'(x, S) dS + V_0(x) \quad (21)$$

in $0 \leq x \leq 1$. Die Ausdehnung auf die ganze x -Achse geschieht durch periodische Fortsetzung und bietet keine Schwierigkeiten.

Trivialerweise erhält man zu $V_0(x)$ äquivalente Potentiale durch Verschiebung von V_0 längs der x -Achse. Es kann gezeigt werden, dass unsere $V(x, s)$ nicht von dieser trivialen Form sind.

Ein wichtiger Spezialfall ist noch zu erwähnen: Für $V_0 \equiv 0$ (freie Elektronen) ergibt unser Verfahren $\delta V \equiv 0$ und damit $V(x, s) \equiv 0$. Man kann allgemeiner zeigen, dass in diesem Fall keine Scharen von äquivalenten Potentialen der in unserem Satz angegebenen Art existieren können.

4. Konvergenz des Verfahrens.

Wir betrachten das Intervall $0 \leq x \leq 1$. Sei dort

$$|f_k|, |g_k|, |f'_k|, |g'_k| < A_k = \text{const} < \infty$$

für $k \leq n$ (erfüllt für $n = 0$). Dann ist gemäss Definition

$$|G_k| < 2 \sum_{i+j=k} A_i A_j, \quad |K'_k| < 8 \sum_{i+j+h=k} A_i A_j A_h.$$

Die Rekursionsformel (20) liefert dann

$$|f_{n+1}| \leq \frac{1}{n+1} \int_0^1 \left| \sum_{i+j+h=n} G_i f_j K'_h \right| dt < \frac{16}{n+1} \sum_{\Sigma i_h = n} \prod_{h=1}^6 A_{i_h} \equiv A_{n+1}.$$

Analog:

$$|g_{n+1}| < A_{n+1}.$$

Wegen $G_n(x, x) = 0$ folgt aus (20)

$$(n+1) f'_{n+1}(x) = \int_0^x \sum_{i+j+h=n} \frac{\partial G_i(x, t)}{\partial x} f_j(t) K'_h(t) dt$$

und daraus wie oben

$$|f'_{n+1}| < A_{n+1}$$

und analog

$$|g'_{n+1}| < A_{n+1}.$$

Die Reihen (18) werden also majorisiert durch

$$y(s) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n s^n.$$

Nach Definition ist

$$(n+1) A_{n+1} = 16 \sum_{\Sigma i_h = n} \prod_{h=1}^6 A_{i_h}.$$

Multiplikation mit s^n und Summation über n ergibt

$$\frac{dy}{ds} = 16 y^6.$$

Diese Gleichung hat die Lösung

$$y = A_0 (1 - 80 A_0^5 s)^{-1/5}$$

$y = \sum A_n s^n$ konvergiert also gleichmässig und absolut in

$$|s| \leq s_0 < (80 A_0^5)^{-1}$$

und damit auch die Reihen für f und g .

Literaturverzeichnis.

- 1) KITTEL und MITCHELL, Phys. Rev. **96**, 1488 (1954); LUTTINGER und KOHN, Phys. Rev. **97**, 869 (1955); KOHN, Phys. Rev. **105**, 509 (1957).
- 2) M. J. O. STRUTT, Lamé'sche, Mathieu'sche und verwandte Funktionen. Erg. Math. Bd. I₃, Springer 1932, p. 12ff.
- 3) JOST und KOHN, Phys. Rev. **88**, 382 (1952).