

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

---

Scuola di Scienze  
Dipartimento di Fisica e Astronomia  
Corso di Laurea in Fisica

# Reticoli cristallini, spettri a bande e modello di Kroenig-Penney

Relatore:  
Prof. Roberto Zucchini

Presentata da:  
Giulia Pieramici

Anno Accademico 2018/2019

## Sommario

In questa tesi viene studiato il problema della soluzione dell'equazione di Schroedinger per elettroni soggetti al potenziale periodico di un reticolo cristallino. Per semplicità matematica viene considerato il problema analogo unidimensionale per potenziali periodici ideali, specificamente i modelli di Kroenig-Penney e del pettine di Dirac. La struttura a bande dello spettro energetico viene analizzata in dettaglio.

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Potenziali periodici in una dimensione</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Modelli di potenziali periodici unidimensionali</b>	<b>13</b>
3.1	Il modello di Kroenig-Penney . . . . .	13
3.2	Il modello del pettine di Dirac . . . . .	18

# 1 Introduzione

Lo stato solido è una forma di aggregazione della materia caratterizzata da una forte interazione fra le particelle costituenti, siano esse atomi, ioni o molecole. Queste particelle si trovano molto vicine fra loro e, a causa dell'agitazione termica, compiono piccole oscillazioni attorno a posizioni di riposo fisse. Come conseguenza, materiali allo stato solido hanno una forma geometrica propria e un volume quasi invariante.

In particolare, quando le particelle costituenti il materiale allo stato solido sono disposte secondo uno schema discreto e regolare nelle tre dimensioni dello spazio, la configurazione che esse formano è chiamata struttura cristallina. L'aspetto principale di tale struttura è la periodicità, osservata sperimentalmente tramite il fenomeno della diffrazione dei raggi X.

La cristallografia si occupa dello studio dei cristalli e delle loro proprietà. Dato l'interesse rivestito dalle caratteristiche geometriche della struttura cristallina, è utile associare ad ogni atomo o gruppo di atomi un punto dello spazio, la sua posizione di equilibrio. La collezione discreta di tali punti forma il *reticolo cristallino*, caratterizzato dalla proprietà della periodicità spaziale che gli conferisce una determinata simmetria. Dunque, nel complesso, un cristallo ideale può essere descritto come costituito dalla collocazione di copie di una cella unitaria di base, formata da uno o più atomi, in corrispondenza dei nodi del reticolo.

Dal punto di vista geometrico, in tre dimensioni, il reticolo, detto reticolo di Bravais, può essere rappresentato da un insieme di punti i cui vettori posizione  $\mathbf{a}$  sono combinazioni lineari a coefficienti interi  $n_i$  di vettori di base linearmente indipendenti  $\mathbf{u}_i$ , chiamati periodi fondamentali del reticolo:

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{u}_i.$$

La cella geometrica unitaria  $C$  è la regione dei punti geometrici

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 \nu_i \mathbf{u}_i,$$

dove  $-1/2 \leq \nu_i \leq +1/2$ . Traslando  $C$  delle distanze e nelle direzioni determinate dai vettori  $\mathbf{a}$  del reticolo di Bravais, si ottiene una disposizione periodica di celle che riempiono tutto lo spazio e ciascuna di esse contiene precisamente un nodo del reticolo. Il reticolo cristallino fisico, formato da atomi, invece può essere descritto come costituito da celle unitarie di base identiche, ciascuna delle quali è disposta in corrispondenza di un nodo del reticolo in modo tale che ciascun nodo sia occupato precisamente da una ed una sola cella. La cella unitaria di base tipo è costituita da uno o da più atomi, uguali o diversi.

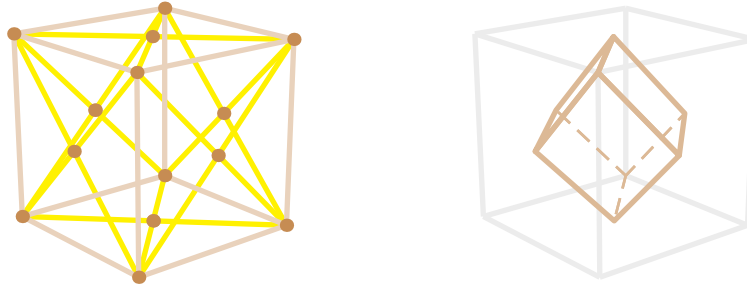


Figura 1: Il reticolo di Bravais di una struttura cristallina di un sale comune appartiene alla classe cubica a facce centrate. Una sua porzione è mostrata qui sul lato sinistro. La cella unitaria corrispondente, che non va confusa con la cella cubica convenzionale, è illustrata sul lato destro.

Ai fini della classificazione dei cristalli, è utile considerare, come blocco costituente il reticolo, la cella convenzionale. Questa ha la stessa simmetria del reticolo e, traslata ed eventualmente ruotata, riempie l'intero solido cristallino. Proprio sulla base della forma della cella convenzionale vengono distinti quattordici tipi di reticolo di Bravais. Uno di questi è mostrato in figura 1.

Nel cristallo ogni elettrone è sottoposto ad una serie intricata di interazioni. Da una parte è soggetto al campo elettrostatico attrattivo degli ioni che formano il reticolo. Dall'altra esso risente del campo elettrostatico repulsivo di tutti gli altri elettroni. Nell'approssimazione di campo autoconsistente tutte queste interazioni possono essere descritte da un'energia potenziale efficace  $U$ . Dal momento che questa include anche le interazioni reciproche fra elettroni, questi ultimi possono essere trattati come indipendenti. La forma di  $U$  può essere piuttosto complicata, ad ogni modo, per ragioni fisiche,  $U$  deve avere la periodicità del reticolo quindi

$$U(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{x}).$$

Analizzando quantisticamente il comportamento di questi elettroni attraverso la risoluzione del problema di Schroedinger si ottiene lo spettro energetico tipico di un solido cristallino, uno *spettro a bande*. Dato che la risoluzione dell'equazione di Schroedinger stazionaria è complicata, si studia il problema analogo in una dimensione. Il risultato analitico per un generico potenziale periodico fornisce uno spettro formato da bande di energia continue intervallate da tratti proibiti: al crescere dell'energia diminuisce la larghezza delle bande proibite e aumenta quella delle energie accessibili.

Si può procedere più nello specifico risolvendo il problema con potenziali ideali molto semplici. Il modello di Kroenig-Penney descrive l'elettrone sottoposto al susseguirsi periodico di buche di potenziale rettangolari uguali fra loro. Quando la larghezza delle buche è infinitesima questo modello può essere approssimato con quello più semplice del pettine di Dirac.

## 2 Potenziali periodici in una dimensione

È interessante studiare il comportamento della funzione d'onda  $\phi(x)$  soggetta ad una traslazione spaziale di una distanza pari a quella del passo  $a$  del reticolo. Si definisce l'operatore  $T$  in modo che, applicato alla funzione  $\phi(x)$ , la trasla indietro di  $a$ :

$$\phi^T(x) = \phi(x + a). \quad (1)$$

L'operatore di traslazione  $T$  gode delle seguenti proprietà:

- è lineare, infatti, prese due generiche funzioni  $\phi_1$  e  $\phi_2$  e due scalari  $c_1$  e  $c_2$ , risulta

$$\begin{aligned} (c_1\phi_1 + c_2\phi_2)^T(x) &= (c_1\phi_1 + c_2\phi_2)(x + a) \\ &= c_1\phi_1(x + a) + c_2\phi_2(x + a) = c_1\phi_1^T(x) + c_2\phi_2^T(x); \end{aligned} \quad (2)$$

- è unitario, infatti preserva il prodotto interno tra funzioni d'onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1^T(x)^* \phi_2^T(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1(x + a)^* \phi_2(x + a) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1(x')^* \phi_2(x') dx' \quad (3)$$

dove  $x' = x + a$ ;

- è tale che, se  $\phi$  è un'autofunzione appartenente all'autovalore  $w$ , allora anche  $\phi^T$  lo è, infatti, con un generico potenziale periodico  $U(x) = U(x + a)$ , si ha

$$\frac{d^2\phi^T(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar}(w - U(x))\phi^T(x) = \frac{d^2\phi^T(x')}{dx'^2} + \frac{2m}{\hbar}(w - U(x'))\phi^T(x') \Big|_{x'=x+a}; \quad (4)$$

inoltre  $\phi^T$  gode delle stesse condizioni di regolarità di  $\phi$  cioè  $\phi^T$  e  $\frac{d\phi^T}{dx}$  sono continue e  $\phi^T$  è soggetta alle stesse condizioni di limitatezza di  $\phi$ .

L'equazione di Schroedinger è un'equazione differenziale al secondo ordine pertanto una qualunque sua soluzione è una combinazione lineare di due funzioni linearmente indipendenti. *Nel caso in cui il potenziale è periodico le due autofunzioni dell'energia linearmente indipendenti possono essere scelte in modo da soddisfare le relazioni di quasi-periodicità:*

$$\phi_{w1}^T = e^{iK_w a} \phi_{w1}, \quad \phi_{w2}^T = e^{-iK_w a} \phi_{w2}, \quad (5)$$

dove  $K_w$  ha valori reali ed è un vettore d'onda dipendente dall'autovalore energetico  $w$ . Dunque la funzione d'onda traslata di una quantità pari al passo reticolare  $a$  differisce dall'originaria di una fase.

*Dimostrazione.* Data la base ortonormale  $\hat{\phi}_{w1}, \hat{\phi}_{w2}$  di autofunzioni dell'energia, queste soddisfano la relazione  $\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_{wi}^* \hat{\phi}_{w'j} dx = \delta_{ij} \delta(w - w')$  dove  $i, j = 1, 2$ . Fissato l'autovalore  $w$  anche le funzioni d'onda  $\hat{\phi}_{w1}^T$  e  $\hat{\phi}_{w2}^T$  sono autofunzioni appartenenti a  $w$  e possono essere espresse come combinazione lineare delle autofunzioni della base scelta, quindi:

$$\hat{\phi}_{w1}^T = t_{w11} \hat{\phi}_{w1} + t_{w21} \hat{\phi}_{w2}, \quad \hat{\phi}_{w2}^T = t_{w12} \hat{\phi}_{w1} + t_{w22} \hat{\phi}_{w2}, \quad (6)$$

dove  $t_{wji}$  sono coefficienti complessi e dipendenti da  $w$ , inoltre formano una matrice unitaria con  $j$  indice di riga e  $i$  indice di colonna. Infatti la matrice

$$t_w = \begin{pmatrix} t_{w11} & t_{w12} \\ t_{w21} & t_{w22} \end{pmatrix} \quad (7)$$

soddisfa la relazione

$$t_w^\dagger t_w = \mathbb{1}_2 \iff t_w^\dagger = t_w^{-1}. \quad (8)$$

Infatti, utilizzando le espansioni (6), si vede come l'operatore di traslazione  $T$  preserva l'ortonormalità:

$$\begin{aligned} \delta_{ij} \delta(w - w') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_{wi}^* \hat{\phi}_{w'j} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_{wi}^{T*} \hat{\phi}_{w'j}^T dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \sum_k t_{wki} \hat{\phi}_{wk} \right)^* \left( \sum_l t_{w'lj} \hat{\phi}_{w'l} \right) dx \\ &= \sum_{k,l} t_{wki}^* t_{w'lj} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_{wk}^* \hat{\phi}_{w'l} dx \\ &= \sum_{k,l} t_{wki}^* t_{w'lj} \delta_{kl} \delta(w - w') = \sum_k t_{wki}^* t_{wkj} \delta(w - w'). \end{aligned} \quad (9)$$

Dall'uguaglianza tra primo e ultimo membro segue  $\sum_k t_{wki}^* t_{wkj} = \delta_{ij}$  cioè

$$\begin{pmatrix} t_{w11} & t_{w12} \\ t_{w21} & t_{w22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{w11} & t_{w12} \\ t_{w21} & t_{w22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Esiste una combinazione lineare non identicamente nulla  $\phi = \sum_i c_i \hat{\phi}_{wi}$  tale che  $\phi^T = z\phi$  dove  $z$  è un numero complesso di modulo unitario. Inserendo l'espansione di  $\phi$  si ottengono:

$$\begin{aligned} \phi^T &= (c_1 \hat{\phi}_{w1} + c_2 \hat{\phi}_{w2})^T = c_1 \hat{\phi}_{w1}^T + c_2 \hat{\phi}_{w2}^T \\ &= c_1 t_{w11} \hat{\phi}_{w1} + c_1 t_{w21} \hat{\phi}_{w2} + c_2 t_{w12} \hat{\phi}_{w1} + c_2 t_{w22} \hat{\phi}_{w2}; \end{aligned} \quad (11a)$$

$$z\phi = z(c_1 \hat{\phi}_{w1} + c_2 \hat{\phi}_{w2}) = c_1 z \hat{\phi}_{w1} + c_2 z \hat{\phi}_{w2}. \quad (11b)$$



Uguagliando i due termini si ha il seguente sistema lineare:

$$\begin{cases} (t_{w11} - z)c_1 + t_{w12}c_2 = 0 \\ t_{w21}c_1 + (t_{w22} - z)c_2 = 0 \end{cases}, \quad (12)$$

la cui matrice associata è

$$M(z) = \begin{pmatrix} t_{w11} - z & t_{w12} \\ t_{w21} & t_{w22} - z \end{pmatrix} = t_w - z\mathbb{1}_2. \quad (13)$$

Il sistema ha soluzioni non nulle  $c_1, c_2$  solo se il determinante  $\det M(z)$  della matrice  $M(z)$  è nullo. La condizione  $\det M(z) = 0$  è l'equazione agli autovalori della matrice unitaria  $t_w$ ; di conseguenza esiste sempre almeno un autovalore  $z$ , soluzione dell'equazione quadratica, di modulo 1 perché matrici unitarie preservano il prodotto scalare quindi, con  $t_w c = zc$ , si ha  $\langle c, c \rangle = \langle t_w c, t_w c \rangle = \langle zc, zc \rangle = zz^* \langle c, c \rangle \rightarrow zz^* = 1$ .

L'equazione agli autovalori  $\det M(z) = z^2 - (t_{w11} + t_{w22})z + t_{w11}t_{w22} - t_{w12}t_{w21} = 0$  può avere due soluzioni distinte  $z_{w1}$  e  $z_{w2}$  oppure una sola soluzione  $z_{w0}$ . In entrambi i casi in totale si hanno due autovettori linearmente indipendenti: quando gli autovalori sono  $z_{w1}$  e  $z_{w2}$  diversi fra loro, a ciascuno di essi corrisponde un autovettore, mentre, se l'autovalore è unico  $z_{w0}$ , da quanto segue risulta che il rango della matrice  $t_w - z_{w0}\mathbb{1}_2$  è nullo da cui il rango  $r_w(z)$  di  $t_w$  è  $r_w(z) = 2$  perciò sono 2 gli autovettori linearmente indipendenti corrispondenti. Infatti, siccome  $t_w$  è una matrice  $2 \times 2$  unitaria, essa si può scrivere nel modo seguente:

$$e^{i\zeta} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix},$$

dove  $\zeta$  è un angolo e  $a, b$  sono numeri complessi che soddisfano la relazione  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ; l'equazione secolare  $\det(t_w - \lambda\mathbb{1}_2) = 0 \rightarrow 0 = e^{2i\zeta}[\lambda^2 - (a + a^*)\lambda + aa^* + bb^*] \rightarrow 0 = \lambda^2 - 2\Re(a)\lambda + 1 = (\lambda - \lambda_+)(\lambda - \lambda_-)$  ha un'unica soluzione solo se  $\lambda_+ = \lambda_-$  cioè se  $\lambda^2 - 2\Re(a)\lambda + 1$  è un quadrato; in tal caso  $[\Re(a)]^2 = 1 \rightarrow \Re(a) = \pm 1$ . Da qui segue  $1 = |a|^2 + |b|^2 = [\Re(a)]^2 + [\Im(a)]^2 + |b|^2$  che implica  $\Im(a) = b = 0$  dunque  $t_w$  ha la forma

$$e^{2i\zeta} \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Quindi con un unico autovalore la matrice ha rango massimo.

Denotando gli autovalori, eventualmente coincidenti, con  $z_{wi}$  dove  $i = 1, 2$  indipendentemente da se siano uguali o distinti, l'equazione rappresentante il sistema lineare (12) è

$$\sum_k (t_{wjk} - z_{wi}\delta_{jk})c_{wik} = 0, \quad (14)$$

dove  $c_{wij}$  è la componente  $j$ -esima dell'autovettore  $i$ -esimo. Risulta che

$$\sum_k c_{wik}^* c_{wjk} = \delta_{ij}. \quad (15)$$

Infatti, usando la (14), si ha

$$\begin{aligned}
z_{wi}^* z_{wj} \sum_k c_{wik}^* c_{wjk} &= \sum_k (z_{wi} c_{wik})^* z_{wj} c_{wjk} = \sum_k \left( \sum_l z_{wi} \delta_{kl} c_{wil} \right)^* \left( \sum_m z_{wj} \delta_{km} c_{wjm} \right) \\
&= \sum_k \left( \sum_l t_{wkl} c_{wil} \right)^* \left( \sum_m t_{wkm} c_{wjm} \right) = \sum_{l,m} \left( \sum_k t_{wkl}^* t_{wkm} \right) c_{wil}^* c_{wjm} \\
&= \sum_{l,m} \delta_{lm} c_{wil}^* c_{wjm} = \sum_k c_{wik}^* c_{wjk}. \quad (16)
\end{aligned}$$

Per  $z_{w1} \neq z_{w2}$ , dato che  $|z| = 1 \Rightarrow z_{wi}^* = 1/z_{wi}$ , risulta  $z_{wi}^{-1} z_{wj} \sum_k c_{wik}^* c_{wjk} = \sum_k c_{wik}^* c_{wjk} \rightarrow (z_{wj} - z_{wi}) \sum_k c_{wik}^* c_{wjk} = 0$  che implica  $\sum_k c_{wik}^* c_{wjk} = 0$  quando  $i \neq j$ ; quindi i due autovettori sono ortogonali e possono essere normalizzati. Mentre invece, per  $z_{w1} = z_{w2}$ , ci sono sicuramente due autovettori linearmente indipendenti per quanto visto sopra: questi possono essere scelti normalizzati e ortogonali.

Le funzioni  $\phi_{w1}$  e  $\phi_{w2}$  definite con gli autovettori  $c_{w1}$  e  $c_{w2}$  tramite la combinazione lineare  $\phi_{wi} = \sum_j c_{wij} \hat{\phi}_{wj}$  sono autofunzioni appartenenti a  $w$  perché le  $\hat{\phi}_{wi}$  lo sono e sono linearmente indipendenti come  $c_{w1}$  e  $c_{w2}$ . Inoltre

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{wi}^* \phi_{w'j} dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \sum_k c_{wik} \hat{\phi}_{wk} \right)^* \left( \sum_l c_{w'jl} \hat{\phi}_{w'l} \right) dx \\
&= \sum_{k,l} c_{wik}^* c_{w'jl} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\phi}_{wk}^* \hat{\phi}_{w'l} = \sum_{k,l} c_{wik}^* c_{w'jl} \delta_{kl} \delta(w - w') \\
&= \sum_k c_{wik}^* c_{w'jk} \delta(w - w') = \delta_{ij} \delta(w - w'), \quad (17)
\end{aligned}$$

quindi  $\phi_{w1}$  e  $\phi_{w2}$  soddisfano le relazioni di ortonormalità. Per quanto riguarda il traslato di  $\phi_{wi}$ ,

$$\begin{aligned}
\phi_{wi}^T &= \sum_j c_{wij} \hat{\phi}_{wj}^T = \sum_j c_{wij} \left( \sum_k t_{wkj} \hat{\phi}_{wk} \right) = \sum_k \left( \sum_j c_{wij} t_{wkj} \right) \hat{\phi}_{wk} \\
&= \sum_k \left( \sum_j z_{wi} \delta_{kj} c_{wij} \right) \hat{\phi}_{wk} = \sum_k z_{wi} c_{wik} \hat{\phi}_{wk} = z_{wi} \phi_{wi}.
\end{aligned} \quad (18)$$

Il Wronskiano di  $\phi_{w1}$  e  $\phi_{w2}$  è  $W(\phi_{w1}, \phi_{w2}) \doteq \phi_{w1} \frac{d\phi_{w2}}{dx} - \phi_{w2} \frac{d\phi_{w1}}{dx}$ . Applicando l'operatore di traslazione  $T$ ,

$$\begin{aligned}
W(\phi_{w1}, \phi_{w2})^T(x) &= W(\phi_{w1}, \phi_{w2})(x+a) = \phi_{w1}(x+a) \frac{d\phi_{w2}(x+a)}{dx} - \phi_{w2}(x+a) \frac{d\phi_{w1}(x+a)}{dx} \\
&= \phi_{w1}^T(x) \frac{d\phi_{w2}^T(x)}{dx} - \phi_{w2}^T(x) \frac{d\phi_{w1}^T(x)}{dx} = z_{w1} \phi_{w1}(x) z_{w2} \frac{d\phi_{w2}(x)}{dx} - z_{w2} \phi_{w2}(x) z_{w1} \frac{d\phi_{w1}(x)}{dx} \\
&= z_{w1} z_{w2} W(\phi_{w1}, \phi_{w2})(x), \quad (19)
\end{aligned}$$

ma  $W(\phi_{w1}, \phi_{w2})^T(x) = W(\phi_{w1}, \phi_{w2})(x+a) = W(\phi_{w1}, \phi_{w2})(x)$  perché il Wronskiano è costante, quindi  $z_{w1}z_{w2} = 1$  in quanto  $W(\phi_{w1}, \phi_{w2}) \neq 0$  perché  $\phi_{w1}$  e  $\phi_{w2}$  sono ortogonali dunque linearmente indipendenti. Dato che  $|z_{wi}| = 1$ ,  $z_{wi} = e^{i\varphi_i}$  cioè  $z_{w1} = e^{i\varphi_1}$  e  $z_{w2} = e^{i\varphi_2}$ , quindi necessariamente  $z_{w2} = z_{w1}^*$  da cui  $\varphi_1 = -\varphi_2$ . In particolare questi angoli possono essere presi utilizzando il vettore d'onda  $K_w$  unidimensionale dunque

$$z_{w1} = e^{iK_w a} \quad \text{e} \quad z_{w2} = e^{-iK_w a}. \quad (20)$$

Inserendo le espressioni di  $z_{wi}$  nella relazione (18) si ottengono:

$$\phi_{w1}^T = e^{iK_w a} \phi_{w2} \quad \text{e} \quad \phi_{w2}^T = e^{-iK_w a} \phi_{w1}$$

dunque il risultato (5) è dimostrato.

Il risultato ottenuto trova una sua applicazione nel **teorema di Bloch** per le funzioni quasi-periodiche. Esso afferma che le autofunzioni dell'energia  $\phi_{wi}$  si fattorizzano come

$$\phi_{wi}(x) = e^{iK_w x} u_{wi}(x) \quad (21)$$

dove l'ampiezza di Bloch  $u_{wi}(x)$  è una funzione periodica cioè

$$u_{wi}^T(x) = u_{wi}(x+a) = u_{wi}(x). \quad (22)$$

Infatti, partendo dalla definizione  $u_{wi}(x) \doteq e^{-iK_w x} \phi_{wi}(x)$ , essa implica  $\phi_{wi}(x) = e^{iK_w x} u_{wi}(x)$  e, applicando le relazioni precedenti,

$$\begin{aligned} u_{wi}^T(x) &= u_{wi}(x+a) = e^{-iK_w(x+a)} \phi_{wi}(x+a) = e^{-iK_w(x+a)} \phi_{wi}^T(x) \\ &= e^{-iK_w x} e^{-iK_w a} e^{iK_w a} \phi_{wi}(x) = e^{-iK_w x} \phi_{wi}(x) = u_{wi}(x). \end{aligned} \quad (23)$$

Lo spettro energetico di funzioni d'onda soggette a potenziali periodici si organizza in bande continue infatti il coseno di  $K_w a$ , funzione dell'autovalore energetico  $w$ , può essere espresso come  $\cos(K_w a) = F(w)$  con

$$F(w) \doteq \frac{W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2})}{2W(\chi_{w1}, \chi_{w2})} \quad (24)$$

dove  $\chi_{w1}$  e  $\chi_{w2}$  sono due qualsiasi soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Schroedinger con autovalore energetico  $w$ .  $F(w)$  è indipendente dalle  $\chi_{wi}$ .

*Dimostrazione.* Presa un'autofunzione quasi-periodica  $\phi_w$  dell'energia appartenente all'autovalore dell'energia  $w$ , per un certo vettore  $K_w$  risultano:

$$\phi_w^T = e^{iK_w a} \phi_w, \quad (25)$$

$$\frac{d\phi_w^T}{dx} = e^{iK_w a} \frac{d\phi_w}{dx}; \quad (26)$$

queste espressioni, espandendo l'autofunzione come  $\phi_w = \sum_j b_{wj} \chi_{wj}$ , diventano

$$\sum_j b_{wj} \chi_{wj}^T = e^{iK_w a} \sum_j b_{wj} \chi_{wj} \rightarrow \sum_j [\chi_{wj}^T - e^{iK_w a} \chi_{wj}] b_{wj} = 0; \quad (27)$$

$$\sum_j b_{wj} \frac{d\chi_{wj}^T}{dx} = e^{iK_w a} \sum_j b_{wj} \frac{d\chi_{wj}}{dx} \rightarrow \sum_j \left[ \frac{d\chi_{wj}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{wj}}{dx} \right] b_{wj} = 0. \quad (28)$$

La matrice associata al sistema lineare è la seguente:

$$\begin{pmatrix} \chi_{w1}^T - e^{iK_w a} \chi_{w1} & \chi_{w2}^T - e^{iK_w a} \chi_{w2} \\ \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{w1}}{dx} & \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{w2}}{dx} \end{pmatrix} \quad (29)$$

ed il suo determinante

$$\begin{aligned} & [\chi_{w1}^T - e^{iK_w a} \chi_{w1}] \left[ \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{w2}}{dx} \right] - [\chi_{w2}^T - e^{iK_w a} \chi_{w2}] \left[ \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{w1}}{dx} \right] \\ &= \chi_{w1}^T \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} - \chi_{w2}^T \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} + e^{2iK_w a} \left[ \chi_{w1} \frac{d\chi_{w2}}{dx} - \chi_{w2} \frac{d\chi_{w1}}{dx} \right] \\ &\quad - e^{iK_w a} \left[ \chi_{w1} \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} - \chi_{w2}^T \frac{d\chi_{w1}}{dx} - \chi_{w2} \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} + \chi_{w1}^T \frac{d\chi_{w2}}{dx} \right] \end{aligned} \quad (30)$$

può essere riscritto come  $W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}^T) + e^{2iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) - e^{iK_w a} [W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2})]$ . Siccome i coefficienti  $b_{wj}$  della combinazione lineare non sono entrambi nulli, questo implica che il determinante della matrice associata al sistema lineare sia nullo:

$$\begin{aligned} & W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}^T) + e^{2iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) - e^{iK_w a} [W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2})] = 0 \\ & \rightarrow [e^{-iK_w a} + e^{iK_w a}] W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) - [W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2})] = 0 \\ & \rightarrow \cos(K_w a) = \frac{W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2})}{2W(\chi_{w1}, \chi_{w2})}, \end{aligned} \quad (31)$$

dove è stata usata la proprietà già vista  $W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}^T) = W(\chi_{w1}, \chi_{w2})$ .

Dato che  $|\cos(K_w a)| \leq 1$ , gli unici valori di  $w$  appartenenti allo spettro energetico sono quelli per i quali  $-1 \leq F(w) \leq +1$ . Così lo spettro consiste di intervalli di valori continui di energia detti *bande energetiche*. Nello studiare la struttura delle bande risulta comodo parametrizzare l'autovalore dell'energia  $w$  in termini del vettore d'onda cinematico  $k \geq 0$  ponendo  $w = w_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + w_0$  dove  $w_0$  è il minimo della banda, perciò si pongono anche  $K_k = K_{w_k}$ ,  $\chi_{ki} = \chi_{w_k i}$ ,  $F(ka) = F(w_k)$ . Si ottiene quindi  $\cos(K_k a) = F(ka)$  con  $-1 \leq F(ka) \leq +1$ . La funzione  $F(ka)$  è definita per tutti i valori reali di  $k$  in quanto  $k$  entra quadraticamente nell'espressione  $w_k$  e  $F(-ka) = F(ka)$ .

Per alti valori di  $w$  l'effetto del potenziale diventa trascurabile e la dinamica è approssimativamente quella di una particella libera. Le  $\chi_{ki}$  possono quindi essere scelte nel modo seguente:

$$\chi_{w1}(x) \simeq e^{ikx} \quad \text{e} \quad \chi_{w2}(x) \simeq e^{-ikx}. \quad (32)$$

Di conseguenza:

$$\chi_{w1}^T(x) = \chi_{w1}(x+a) \simeq e^{ik(x+a)} = e^{ika} e^{ikx} \simeq e^{ika} \chi_{w1}, \quad (33)$$

$$\chi_{w2}^T(x) = \chi_{w2}(x+a) \simeq e^{-ik(x+a)} = e^{-ika} e^{-ikx} \simeq e^{-ika} \chi_{w2}. \quad (34)$$

Calcolando i Wronskiani combinando le quattro funzioni si ottengono:

$$W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) \simeq e^{ikx} \frac{d}{dx} e^{-ikx} - e^{-ikx} \frac{d}{dx} e^{ikx} = -ike^{ikx} e^{-ikx} - ike^{-ikx} e^{ikx} = -2ik, \quad (35)$$

$$W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) \simeq e^{ika} [e^{ikx} (-ik) e^{-ikx} - e^{ikx} (ik) e^{-ikx}] = e^{ika} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) \quad (36)$$

$$W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) \simeq e^{-ika} [e^{ikx} (-ik) e^{-ikx} - e^{ikx} (ik) e^{-ikx}] = e^{-ika} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) \quad (37)$$

Quindi

$$F(ka) = \frac{W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) + W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T)}{2W(\chi_{w1}, \chi_{w2})} \simeq \frac{-2ike^{ika} - 2ike^{-ika}}{2(-2ik)} = \cos(ka).$$

Dal risultato emerge che tutti i valori di  $k$  sufficientemente grandi, ai quali corrispondono valori di  $w$  grandi, sono ammessi perché  $F(ka) \simeq \cos(ka)$  quindi  $-1 \leq F(ka) \leq +1$  senza doverlo imporre. Inoltre risulta  $K_k \simeq k$  dal confronto tra l'espressione di  $F(ka)$  ottenuta e  $\cos(K_k a)$ .

Per valori più bassi di energia e quindi del vettore d'onda  $k$ , la funzione  $F(ka)$  è compresa tra  $-1$  e  $+1$  solo per certi  $k$ . Ordinando, sull'asse reale di  $k$ , gli intervalli nei quali  $F(ka)$  è definita, la funzione  $F(ka)$  è alternatamente crescente e decrescente nel passare da un intervallo all'altro: dalla relazione  $F(ka) = \cos(K_k a)$  il coseno cresce da  $-1$  a  $+1$  dove  $F(ka)$  è crescente e decresce da  $+1$  a  $-1$  dove  $F(ka)$  è decrescente. Pertanto  $K_k$  è una funzione crescente di  $k$  tale che, agli estremi sinistro e destro dell' $n$ -esimo intervallo, vale rispettivamente  $n\pi/a$  e  $(n+1)\pi/a$ ; mentre quando  $k$  salta dall'estremo destro di un intervallo a quello sinistro dell'intervallo successivo  $K_k$  non cambia valore. Esprimendo  $k$  in funzione del vettore d'onda di Bloch  $K_k$ , risulta che  $k$  è discontinuo quando  $K_k = n\pi/a$  con  $n$  intero. Questi salti corrispondono agli spazi che separano gli intervalli nei quali  $k$  è ammesso. Tornando all'energia, si può esprimere  $w$  in funzione del vettore di Bloch cioè  $w = w_k = \frac{\hbar^2 K_k^2}{2m} + w_0$ . Graficando  $w_k(K_k)$  si ottiene la struttura a bande dello spettro energetico dove gli spazi vuoti di energia ai valori di  $K_k = n\pi/a$  sono causati dalla discontinuità di  $k$ .

### 3 Modelli di potenziali periodici unidimensionali

Nelle sezioni successive vengono analizzati due modelli di potenziali periodici unidimensionali: quello di Kroenig-Penney, che ripete la struttura di una barriera o di una buca di potenziale, e quello del pettine di Dirac, basato sulla presenza a distanze costanti di muri o pozzi di Dirac. Quest'ultimo può essere ottenuto dall'altro diminuendo la larghezza e aumentando l'altezza o la profondità delle barriere o delle buche.

#### 3.1 Il modello di Kroenig-Penney

Il potenziale periodico del modello di Kroenig-Penney (cfr. figura 2) è il seguente:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{per } nc - b < x < nc \\ 0 & \text{per } nc < x < nc + a \end{cases} \quad (38)$$

dove  $n$  è un numero intero variabile e  $a, b > 0$  sono scale di lunghezza tali che  $c = a + b$ . La lunghezza  $c$  risulta proprio il passo del reticolo infatti

$$U(x + c) = U(x).$$

Questa proprietà può essere verificata con la seguente analisi. Con  $n$  arbitrario:

- per  $nc - b < x < nc$  si ha  $(n+1)c - b < x + c < (n+1)c$  da cui  $U(x+c) = U(x) = U_0$ ;
- per  $nc < x < nc + a$  si ha  $(n+1)c < x + c < (n+1)c + a$  da cui  $U(x+c) = U(x) = 0$ .

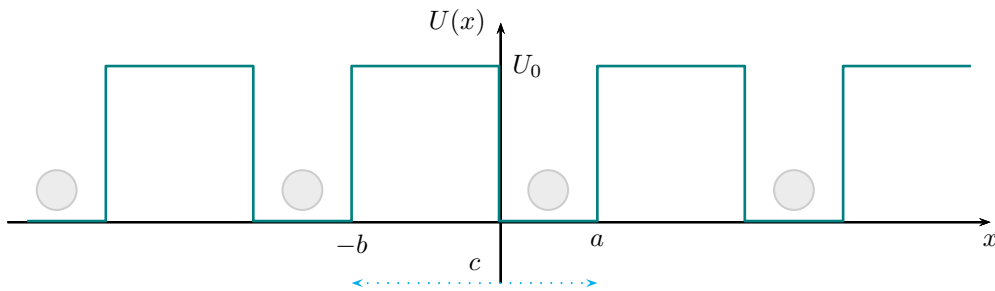


Figura 2: Il potenziale periodico secondo il modello di Kroenig-Penney di un cristallo unidimensionale. I cerchi grigi rappresentano gli ioni del cristallo.

Nei due intervalli l'equazione di Schroedinger è la seguente:

$$\begin{cases} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m(w-U_0)}{\hbar^2}\phi = 0 & \text{per } nc - b < x < nc \\ \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mw}{\hbar^2}\phi = 0 & \text{per } nc < x < nc + a \end{cases} \quad (39)$$

Essa può essere riscritta utilizzando  $k = \frac{(2mw)^{1/2}}{\hbar}$  e  $k' = \frac{(2m(w-U_0))^{1/2}}{\hbar}$ :

$$\begin{cases} \frac{d^2\phi}{dx^2} + k'^2\phi = 0 & \text{per } nc - b < x < nc \\ \frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0 & \text{per } nc < x < nc + a \end{cases} \quad (40)$$

La soluzione generale è una combinazione lineare di onde piane linearmente indipendenti di numeri d'onda  $k'$ ,  $k$ :

$$\begin{cases} \phi(x) = A_n e^{ik'(x-nc)} + B_n e^{-ik'(x-nc)} & \text{per } nc - b < x < nc \\ \phi(x) = C_n e^{ik(x-nc)} + D_n e^{-ik(x-nc)} & \text{per } nc < x < nc + a \end{cases} \quad (41)$$

per certi coefficienti  $A_n, B_n, C_n, D_n$ . Questi coefficienti non sono indipendenti bensì sono vincolati dalle condizioni di raccordo della funzione d'onda nei punti di discontinuità del potenziale:

- i.  $\phi(nc - b + 0) = \phi(nc - b - 0)$ ;
- ii.  $\phi(nc + 0) = \phi(nc - 0)$ ;
- iii.  $\frac{d\phi(nc-b+0)}{dx} = \frac{d\phi(nc-b-0)}{dx}$ ;
- iv.  $\frac{d\phi(nc+0)}{dx} = \frac{d\phi(nc-0)}{dx}$ .

Usando le condizioni **ii.** e **iv.** si eliminano  $C_n$  e  $D_n$  in favore di  $A_n$  e  $B_n$ . In questa maniera l'espressione (41) diviene:

$$\begin{cases} \phi(x) = A_n e^{ik'(x-nc)} + B_n e^{-ik'(x-nc)} & \text{per } nc - b < x < nc \\ \phi(x) = (A_n + B_n) \cos(k(x-nc)) + \frac{ik'}{k}(A_n - B_n) \sin(k(x-nc)) & \text{per } nc < x < nc + a \end{cases} \quad (42)$$

*Dimostrazione.* Utilizzando inizialmente la **ii.** e la **iv.** si hanno rispettivamente:

$$A_n e^0 + B_n e^0 = C_n e^0 + D_n e^0 \rightarrow A_n + B_n = C_n + D_n; \quad (43)$$

$$A_n (ik') e^0 + B_n (-ik') e^0 = C_n (ik) e^0 + D_n (-ik) e^0 \rightarrow \frac{k'}{k} (A_n - B_n) = C_n - D_n. \quad (44)$$

Risolviendo il sistema di equazioni (43) e (44) si ottengono le espressioni dei coefficienti  $C_n$  e  $D_n$  in funzione di  $A_n$  e  $B_n$ :

$$2C_n = A_n + \frac{k'}{k}A_n + B_n - \frac{k'}{k}B_n \rightarrow C_n = \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{k'}{k}\right)A_n + \left(1 - \frac{k'}{k}\right)B_n \right] \quad (45)$$

$$D_n = C_n - \frac{k'}{k}(A_n - B_n) \rightarrow D_n = \frac{1}{2} \left[ \left(1 - \frac{k'}{k}\right)A_n + \left(1 + \frac{k'}{k}\right)B_n \right] \quad (46)$$

da cui segue il sistema di equazioni (42) delle quali la seconda è ottenuta dalle relazioni  $e^{\pm ik(x-nc)} = \cos(k(x-nc)) \pm i \sin(k(x-nc))$  infatti

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{k'}{k}\right)A_n + \left(1 - \frac{k'}{k}\right)B_n \right] e^{ik(x-nc)} + \frac{1}{2} \left[ \left(1 - \frac{k'}{k}\right)A_n + \left(1 + \frac{k'}{k}\right)B_n \right] e^{-ik(x-nc)} \\ &= \cos(k(x-nc)) \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{k'}{k} + 1 - \frac{k'}{k}\right)A_n + \left(1 - \frac{k'}{k} + 1 + \frac{k'}{k}\right)B_n \right] \\ &\quad + i \sin(k(x-nc)) \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{k'}{k} - 1 + \frac{k'}{k}\right)A_n + \left(1 - \frac{k'}{k} - 1 - \frac{k'}{k}\right)B_n \right]. \end{aligned} \quad (47)$$

I coefficienti  $A_n$  e  $B_n$  del sistema (42) si possono poi esprimere in funzione di  $A_{n-1}$  e  $B_{n-1}$  imponendo le condizioni di raccordo **i.** e **iii.**:

$$A_n = \left[ \cos(ka) + \frac{i}{2} \left( \frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{ik'b} A_{n-1} + \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{ik'b} B_{n-1} \quad (48)$$

$$B_n = -\frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{-ik'b} A_{n-1} + \left[ \cos(ka) - \frac{i}{2} \left( \frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{-ik'b} B_{n-1} \quad (49)$$

*Dimostrazione.* Applicando al risultato (42) le due condizioni di raccordo a sinistra si hanno:

$$A_n e^{-ik'b} + B_n e^{ik'b} = (A_{n-1} + B_{n-1}) \cos(ka) + \frac{ik'}{k} (A_{n-1} - B_{n-1}) \sin(ka), \quad (50)$$

$$(ik')A_n e^{-ik'b} + (-ik')B_n e^{ik'b} = -(A_{n-1} + B_{n-1}) \sin(ka)k + \frac{ik'}{k} (A_{n-1} - B_{n-1}) \cos(ka)k. \quad (51)$$

Infatti  $c = a + b \rightarrow -b = a - c$  quindi  $nc - b = nc + a - c = (n-1)c + a$ . Risolvendo il sistema costituito da (50) e (51) si ottengono

$$2A_n e^{-ik'b} = 2A_{n-1} \cos(ka) + \left[ \left( \frac{ik'}{k} + \frac{ik}{k'} \right) A_{n-1} + \left( -\frac{ik'}{k} + \frac{ik}{k'} \right) B_{n-1} \right] \sin(ka), \quad (52)$$

$$2B_n e^{ik'b} = 2B_{n-1} \cos(ka) + \left[ \left( \frac{ik'}{k} - \frac{ik}{k'} \right) A_{n-1} + \left( -\frac{ik'}{k} - \frac{ik}{k'} \right) B_{n-1} \right] \sin(ka). \quad (53)$$



Da qui seguono (48) e (49).

Dalla teoria generale sui potenziali periodici emerge che per ogni autovalore energetico  $w$  le autofunzioni dell'energia appartenenti a  $w$  possono essere scelte in modo che

$$\phi(x+c) = e^{\pm iK_k c} \phi(x) \quad (54)$$

dove in questo caso  $c$  è il passo del reticolo. Inoltre, considerando la soluzione in uno qualsiasi degli intervalli, risultano

$$A_n = e^{\pm iK_k c} A_{n-1}, \quad B_n = e^{\pm iK_k c} B_{n-1}. \quad (55)$$

*Dimostrazione.* Con  $n$  intero, se  $(n-1)c - b < x < (n-1)c$ , allora  $nc - b < x + c < nc$ . Inserendo  $x+c$  come variabile nell'espressione della soluzione dell'equazione di Schroedinger (42) relativa all'intervallo  $nc - b < x < nc$ , ed usando (54), si ottiene

$$\begin{aligned} \phi(x+c) &= A_n e^{ik'(x+c-nc)} + B_n e^{-ik'(x+c-nc)} \\ &= e^{\pm iK_k c} \left[ A_{n-1} e^{ik'(x-(n-1)c)} + B_{n-1} e^{-ik'(x-(n-1)c)} \right] \end{aligned} \quad (56)$$

da cui seguono le (55).

Inserendo le relazioni (55) nelle espressioni (48) e (49) si ottengono le seguenti equazioni per  $A_{n-1}$  e  $B_{n-1}$ :

$$\left\{ \left[ \cos(ka) + \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \right] e^{ik'b} - e^{\pm iK_k c} \right\} A_{n-1} + \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{ik'b} B_{n-1} = 0; \quad (57)$$

$$-\frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{-ik'b} A_{n-1} + \left\{ \left[ \cos(ka) - \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \right] e^{-ik'b} - e^{\pm iK_k c} \right\} B_{n-1} = 0. \quad (58)$$

Queste equivalgono ad un sistema lineare nelle variabili  $A_{n-1}$  e  $B_{n-1}$  la cui matrice associata è la seguente:

$$\left( \begin{array}{cc} \left[ \cos(ka) + \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \right] e^{ik'b} - e^{\pm iK_k c} & \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{ik'b} \\ -\frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{-ik'b} & \left[ \cos(ka) - \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \right] e^{-ik'b} - e^{\pm iK_k c} \end{array} \right).$$

Affinché le soluzioni siano non nulle il determinante deve annullarsi. Imponendo questa condizione,

$$\begin{aligned} 0 &= \left\{ \left[ \cos(ka) + \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \right] \left( \cos(k'b) + i \sin(k'b) \right) - e^{\pm iK_k c} \right\} \\ &\left\{ \left[ \cos(ka) - \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \right] \left( \cos(-k'b) + i \sin(-k'b) - e^{\pm iK_k c} \right) - \frac{1}{4} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. \sin^2(ka) = e^{\pm 2iK_k c} - 2 \left[ \cos(ka) \cos(k'b) + \frac{i}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \sin(k'b) \right] \right. \\ &\quad \left. e^{\pm iK_k c} + \cos^2(ka) + \frac{1}{4} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right)^2 \sin^2(ka) - \frac{1}{4} \left( \frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right)^2 \sin(ka)^2 \right. \\ &= e^{\pm iK_k c} \left\{ e^{\pm iK_k c} - 2 \left[ \cos(ka) \cos(k'b) - \frac{1}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \sin(k'b) \right] \right\} + \cos^2(ka) \\ &+ \sin^2(ka) \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = e^{\pm iK_k c} \left\{ e^{\pm iK_k c} + e^{\mp iK_k c} - 2 \left[ \cos(ka) \cos(k'b) - \frac{1}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \sin(ka) \sin(k'b) \right] \right\} \rightarrow e^{\pm iK_k c} + e^{\mp iK_k c} \\ &= 2 \left[ \cos(ka) \cos(k'b) - \frac{1}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \sin(k'b) \right], \quad (59) \end{aligned}$$

si ottiene cioè

$$\cos(K_k c) = \cos(ka) \cos(k'b) - \frac{1}{2} \left( \frac{k}{k'} + \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) \sin(k'b). \quad (60)$$

L'equazione (60) individua lo spettro energetico nel modello di Kroenig-Penney. Gli intervalli dei vettori d'onda permessi sono determinati imponendo che il lato destro dell'espressione sia compreso tra  $-1$  e  $+1$ . Di conseguenza si ottiene uno spettro a bande, di cui si ha una rappresentazione in figura 3. La relazione  $w = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  fornisce la soluzione in termini dell'energia  $w$ .

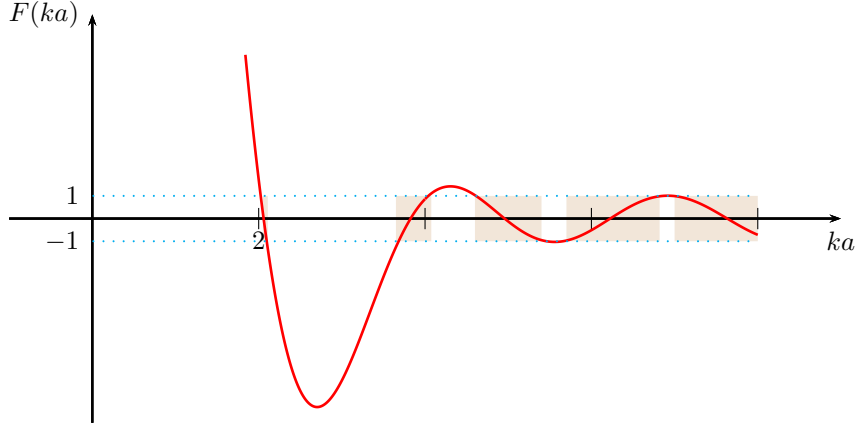


Figura 3: La struttura a bande di uno spettro come determinato dalla (60).  $F(ka)$  è il lato destro della (60). Qui,  $2U_0a^2/\hbar^2 = 16$ .  $F(ka)$  è finito in  $ka = 0$ , ma il suo valore è troppo grande per rientrare nei bordi della figura.

### 3.2 Il modello del pettine di Dirac

Il potenziale periodico nel modello del pettine di Dirac è del tipo:

$$U(x) = \frac{\hbar^2\Omega}{m} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x + na). \quad (61)$$

Quindi, per ogni  $x \neq -na$ ,  $U(x)$  è nullo e l'equazione di Schroedinger è  $\frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0$  dove  $k = \frac{(2m\omega)^2}{\hbar}$ .

Una soluzione generica ha la forma

$$\phi(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} \quad \text{per } na < x < (n+1)a \quad (62)$$

inoltre, nello stesso intervallo, la derivata prima di (62) è  $\frac{d\phi}{dx} = ikA_n e^{ikx} - ikB_n e^{-ikx}$ . Applicando le condizioni di raccordo:

- i.  $\phi(na + 0) - \phi(na - 0) = 0$ ,
- ii.  $\frac{d\phi(na+0)}{dx} - \frac{d\phi(na-0)}{dx} = 2\Omega\phi(na)$ ,

si ottengono le seguenti relazioni:

$$A_n = \left(1 + \frac{\Omega}{ik}\right) A_{n-1} + \frac{\Omega}{ik} e^{-2ikna} B_{n-1}, \quad (63)$$

$$B_n = -\frac{\Omega}{ik} e^{2ikna} A_{n-1} + \left(1 - \frac{\Omega}{ik}\right) B_{n-1}. \quad (64)$$

*Dimostrazione.* Le condizioni di raccordo permettono di scrivere:

$$A_n e^{ikna} + B_n e^{-ikna} - A_{n-1} e^{ikna} - B_{n-1} e^{-ikna} = 0, \quad (65)$$

$$\begin{aligned} ikA_n e^{ikna} - ikB_n e^{-ikna} - ikA_{n-1} e^{ikna} + ikB_{n-1} e^{-ikna} - 2\Omega(A_n e^{ikna} + B_n e^{-ikna}) &= 0 \\ \rightarrow A_n \left(1 - \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{ikna} - B_n \left(1 + \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{-ikna} - A_{n-1} e^{ikna} + B_{n-1} e^{-ikna} &= 0. \end{aligned} \quad (66)$$

Le due equazioni (65) e (66) sono equivalenti al sistema lineare seguente:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} e^{ikna} & e^{-ikna} \\ \left(1 - \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{ikna} & -\left(1 + \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{-ikna} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A_{n-1} e^{ikna} + B_{n-1} e^{-ikna} \\ A_{n-1} e^{ikna} - B_{n-1} e^{-ikna} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikna} & e^{-ikna} \\ e^{ikna} & e^{-ikna} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} \\ \rightarrow \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\left(1 + \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{-ikna} & -e^{-ikna} \\ -\left(1 - \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{ikna} & e^{ikna} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikna} & e^{-ikna} \\ e^{ikna} & e^{-ikna} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{2\Omega}{ik} + 1 & \left(1 + \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{-2ikna} - e^{-2ikna} \\ -\left(1 - \frac{2\Omega}{ik}\right) e^{2ikna} - e^{2ikna} & 1 - \frac{2\Omega}{ik} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 + \frac{2\Omega}{ik} & \frac{2\Omega}{ik} e^{-2ikna} \\ -\frac{2\Omega}{ik} e^{2ikna} & 2 - \frac{2\Omega}{ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\Omega}{ik} & \frac{\Omega}{ik} e^{-2ikna} \\ -\frac{\Omega}{ik} e^{2ikna} & 1 - \frac{\Omega}{ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{\Omega}{ik}\right) A_{n-1} + \frac{\Omega}{ik} e^{-2ikna} B_{n-1} \\ -\frac{\Omega}{ik} e^{2ikna} A_{n-1} + \left(1 - \frac{\Omega}{ik}\right) B_{n-1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (67)$$

Il risultato equivale a (63) e (64).

Per ogni autovalore dell'energia  $w$  le autofunzioni appartenenti a  $w$  possono essere scelte in modo che  $\phi(x+a) = e^{\pm iK_k a} \phi(x)$ . Infatti il potenziale è periodico con passo del reticolo pari ad  $a$  in quanto da  $(n-1)a < x < na$  segue  $na < x+a < (n+1)a$ . Quindi:

$$A_n = e^{i(\pm K_k - k)a} A_{n-1}, \quad (68)$$

$$B_n = e^{i(\pm K_k + k)a} B_{n-1}. \quad (69)$$

*Dimostrazione.* Si calcolano  $\phi(x+a)$  e  $e^{\pm iK_k a} \phi(x)$ .

$$\phi(x+a) = A_n e^{ik(x+a)} + B_n e^{-ik(x+a)}, \quad (70)$$

$$e^{\pm iK_k a} \phi(x) = e^{\pm iK_k a} A_{n-1} e^{ikx} + e^{\pm iK_k a} B_{n-1} e^{-ikx}. \quad (71)$$

Uguagliando i due risultati (70) e (71) e separando i coefficienti  $A_n$  e  $B_n$  si ottengono

$$A_n e^{ika} = e^{\pm iK_k a} A_{n-1}, \quad (72)$$

$$B_n e^{-ika} = e^{\pm iK_k a} B_{n-1}, \quad (73)$$

da cui (68) e (69).

Inserendo le (68) e (69) rispettivamente nelle (63) e (64) si ottengono:

$$\left(1 + \frac{\Omega}{ik}\right)A_{n-1} + \frac{\Omega}{ik}e^{-2ikna}B_{n-1} = e^{i(\pm K_k - k)a}A_{n-1} \rightarrow$$

$$\left(1 + \frac{\Omega}{ik} - e^{i(\pm K_k - k)a}\right)A_{n-1} + \frac{\Omega}{ik}e^{-2ikna}B_{n-1} = 0 \quad (74)$$

$$-\frac{\Omega}{ik}e^{2ikna}A_{n-1} + \left(1 - \frac{\Omega}{ik}\right)B_{n-1} = e^{i(\pm K_k + k)a}B_{n-1} \rightarrow$$

$$-\frac{\Omega}{ik}e^{2ikna}A_{n-1} + \left(1 - \frac{\Omega}{ik} - e^{i(\pm K_k + k)a}\right)B_{n-1} = 0 \quad (75)$$

Queste equazioni costituiscono un sistema lineare; affinché coefficienti  $A_{n-1}$  e  $B_{n-1}$  non siano nulli occorre imporre l'annullamento del determinante.

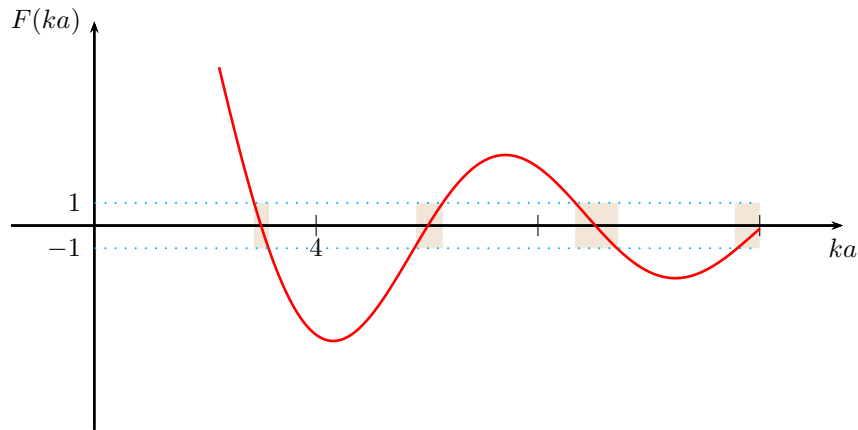


Figura 4: La struttura a bande di uno spettro come determinato dalla (76).  $F(ka)$  è il lato destro della (76). Qui,  $\Omega a = 14.6$ .  $F(ka)$  è finito in  $ka = 0$ , ma il suo valore è troppo grande per rientrare nei bordi della figura.

$$\begin{aligned}
\left(1 + \frac{\Omega}{ik} - e^{i(\pm K_k - k)a}\right) \left(1 - \frac{\Omega}{ik} - e^{i(\pm K_k - k)a}\right) - \left(-\frac{\Omega}{ik} e^{2ikna}\right) \left(\frac{\Omega}{ik} e^{-2ikna}\right) &= 0 \rightarrow \\
1 + e^{\pm iK_k a} \left(e^{\pm iK_k a} - 2 \cos(ka) - \frac{2\Omega}{k} \sin(ka)\right) &= 0 \rightarrow \\
e^{\pm iK_k a} (e^{\mp iK_k a} + e^{\pm iK_k a}) = e^{\pm iK_k a} \left(2 \cos(ka) + \frac{2\Omega}{k} \sin(ka)\right) &\rightarrow \\
\cos(K_k a) = \cos(ka) + \frac{\Omega}{k} \sin(ka). &\quad (76)
\end{aligned}$$

Gli intervalli dei vettori d'onda permessi sono determinati imponendo  $|\cos(ka) + \frac{\Omega}{k} \sin(ka)| \leq 1$ . Pertanto, anche nel modello del pettine di Dirac, lo spettro energetico risulta costituito da bande continue intervallate da valori di  $k$  proibiti, come si nota in figura 4. Sapendo che  $w = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  si ottiene il risultato in funzione dell'energia  $w$ .

## Riferimenti bibliografici

- [1] Ashcroft N. W., Mermin N. D., (1976) *Solid State Physics*, Thomson Press, India, 2003.
- [2] Bransden B. H., Joachain C. J. (1989) *Quantum Mechanics*, 2nd ed., Prentice Hall, Upper Saddle River, 2000.
- [3] Eisberg R. M., Resnick R., (1974) *Quantum Physics: Of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, John Wiley & Sons, Hoboken, 1985.
- [4] Griffiths D. G., (1982) *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2017.
- [5] Ibach H., Lüth H., (1957) *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science*, Springer, Berlin, 2009.
- [6] Kittel C., (1953) *Kittel's Introduction to Solid State Physics*, 9th ed., Wiley John & Sons, Hoboken, 2018.
- [7] Landau L. D., Lifshitz E. M., (1958) *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, Vol. 3*, 3rd ed., Pergamon Press, Oxford, 1977.
- [8] Messiah A., (1961) *Quantum Mechanics*, Dover Publications, New York, 1999.
- [9] Patterson J., Bailey B. C., (2007) *Solid-State Physics: Introduction to the Theory*, 2nd ed., Springer, Berlin, 2010.