

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

Modelli unidimensionali efficaci di elettroni in reticoli cristallini

Relatore:
Prof. Roberto Zucchini

Presentata da:
Fabio Bianchi

Anno Accademico 2024/2025

Sommario

In questa tesi viene trattato il problema dello spettro energetico di un elettrone in un reticolo cristallino soggetto ad un potenziale efficace che modella le complesse interazioni dell'elettrone con gli altri elettroni e gli ioni del reticolo. Per semplicità, vengono studiati reticoli unidimensionali infiniti. Si dimostra che lo spettro energetico è continuo a bande. Vengono analizzati due modelli: il modello di Kroenig-Penney ed il modello del pettine di Dirac.

Indice

1	Introduzione	3
2	Generalità sui reticoli cristallini unidimensionali	4
2.1	Il reticolo cristallino	4
2.2	Potenziali periodici unidimensionali	5
2.2.1	Caratteristiche generali	5
2.2.2	L'operatore traslazione	6
2.2.3	Lo spettro energetico	10
3	Modelli di potenziali unidimensionali	15
3.1	Il modello di Kroenig-Penney	15
3.1.1	Caratteristiche generali	15
3.1.2	Lo spettro energetico	16
3.2	Il modello del pettine di Dirac	19
3.3	Il limite di potenziale infinito e barriera stretta per il modello di Kroenig-Penney	21
3.3.1	Legame col modello del pettine di Dirac	22
3.3.2	Lo spettro energetico	23
3.3.3	Densità degli stati	25
3.3.4	Un esempio	26
A	Discontinuità della derivata prima della funzione d'onda in presenza di potenziali deltiformi	28
B	Cambio di determinazione della funzione arcocoseno	28
	Bibliografia	30

1 Introduzione

Lo studio dello spettro energetico di un reticolo cristallino è un problema molto importante per la fisica dello stato solido. È tuttavia un problema complesso, dovuto al fatto che un reticolo cristallino in generale ha estensione finita, quindi sono presenti degli effetti di bordo, ed è una struttura tridimensionale, cosa che rende le equazioni che si ottengono dal suo studio di difficile, se non impossibile, soluzione. La struttura del potenziale generato da un reticolo è inoltre a sua volta complicata in quanto non deve solo considerare l'interazione tra gli elettroni e gli ioni del reticolo, ma anche dell'interazione reciproca tra gli elettroni stessi. Per ovviare a queste difficoltà ed ottenere modelli risolubili matematicamente vengono generalmente applicate delle approssimazioni [1]: il reticolo viene considerato infinito, in modo da poter trascurare gli effetti di bordo, ed unidimensionale, per semplificare le equazioni. Il potenziale viene invece approssimato mediante un potenziale efficace che tiene conto sia dell'interazione tra gli elettroni e gli ioni del reticolo, che dell'interazione reciproca tra gli elettroni. La forma di questo potenziale è in generale molto complessa, ma è logico aspettarsi che questo sia periodico con la medesima periodicità del reticolo. Un altro ostacolo che si incontra nella risoluzione di un problema di questo tipo è la determinazione della struttura dello spettro energetico, infatti il teorema di struttura spettrale è in genere enunciato considerando potenziali non periodici e le sue implicazioni hanno validità parziale nel caso di potenziali periodici. Lo scopo di questa tesi è di presentare una panoramica sui vari modelli di potenziali unidimensionali che caratterizzano reticoli unidimensionali infiniti ponendo particolare enfasi sulla struttura del loro spettro energetico. Dopo una breve introduzione sulla struttura cristallina tridimensionale ed unidimensionale (Sezione 2.1) vengono trattati in generale i potenziali periodici unidimensionali (Sezione 2.2). Per questi vengono evidenziati i vincoli che la periodicità del potenziale impone sulla funzione d'onda mediante la dimostrazione del teorema di Bloch, arrivando infine a descrivere la struttura dello spettro energetico. Vengono in seguito presentati tre modelli di potenziali periodici unidimensionali: il modello di Kroenig-Penney (Sezione 3.1), in cui il potenziale è una sequenza periodica di buche e barriere di potenziale alternate ed il modello del Pettine di Dirac (Sezione 3.2), in cui il potenziale è una sequenza di delte di Dirac poste ad intervalli regolari. Di tutti i modelli presentati viene ricavata la struttura dello spettro energetico, mentre per l'ultimo viene anche trattata la distribuzione delle funzioni d'onda rispetto al numero d'onda.

2 Generalità sui reticoli cristallini unidimensionali

2.1 Il reticolo cristallino

Un reticolo cristallino [2][3] è una struttura tridimensionale costituita da un insieme di atomi che si ripete spazialmente identico a sè stesso in maniera periodica. Il gruppo di atomi che si ripete è chiamato cella unitaria, mentre l'insieme dei punti dello spazio in cui la cella unitaria e le sue copie sono posizionate è chiamato reticolo (Figure 1 e 2).

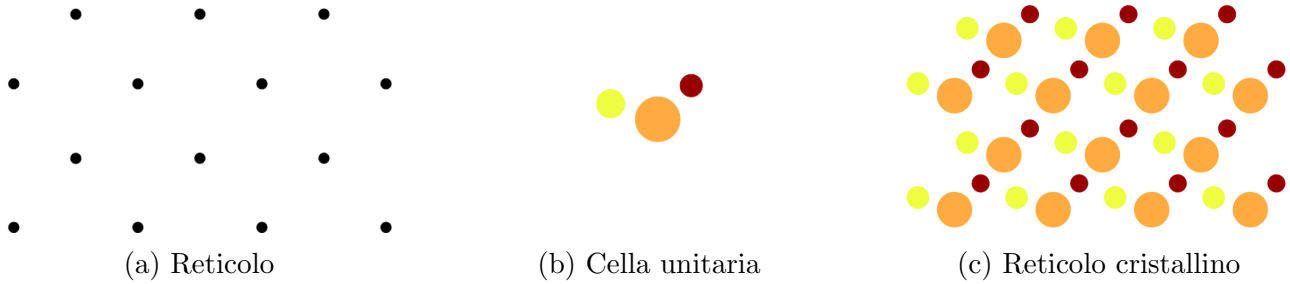
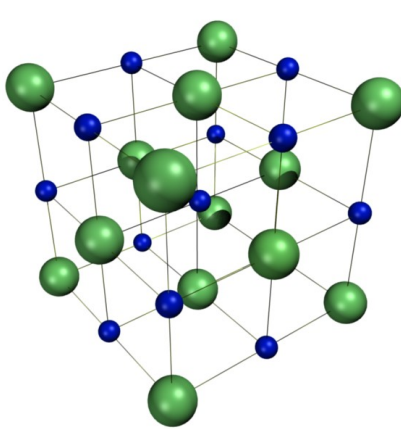
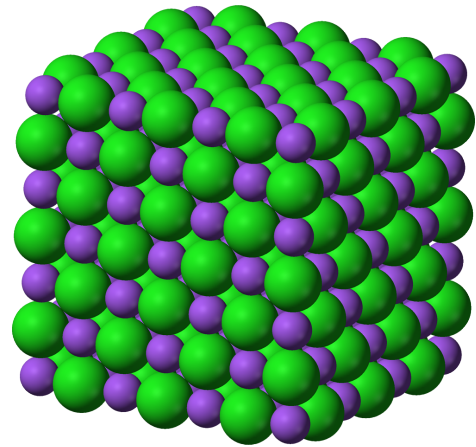


Figura 1: Esempio di reticolo, cella unitaria e reticolo cristallino nel caso bidimensionale. Le immagini riportate in figura 1a e 1c sono una rappresentazione parziale, bisogna considerare infatti che il reticolo si ripete periodicamente uguale a sè stesso su tutto il piano. Nella cella unitaria con colori diversi sono rappresentati atomi di tipo diverso. Da notare che il punto in cui la cella unitaria viene posizionata sui punti del reticolo non è importante, purchè sia lo stesso per tutte le celle.



(a) Cella unitaria tridimensionale per un cristallo di NaCl. In verde sono raffigurati gli ioni Cl^- , mentre in blu gli ioni Na^+ . Con le linee nere sono rappresentati i legami degli atomi con gli atomi più vicini[4].



(b) Porzione di un reticolo cristallino tridimensionale per un cristallo di NaCl. In verde sono raffigurati gli ioni Cl^- , mentre in viola gli ioni Na^+ [5].

Figura 2: Esempio di cella unitaria e di reticolo cristallino per un cristallo di NaCl.

Considerando un sistema di riferimento con l'origine scelta in maniera arbitraria esistono sempre tre vettori linearmente indipendenti \vec{a}_1 , \vec{a}_2 e \vec{a}_3 tali per cui partendo da un punto fissato \vec{r}_0 si costruisce un insieme di punti \vec{r} tramite traslazioni di multipli interi dei vettori \vec{a}_i :

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z} \quad (2.1)$$

in modo tale che la disposizione degli atomi vista dal punto \vec{r}_0 sia esattamente la stessa vista dal punto \vec{r} . L'insieme dei punti \vec{r} costituisce il reticolo. Il reticolo è detto primitivo se presi

due punti dai quali si vede la medesima disposizione degli atomi si può sempre mappare l'uno nell'altro tramite una trasformazione di tipo (2.1). Il reticolo primitivo è importante perchè il parallelepipedo di area $\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ è la cella di minor volume con la quale si può costruire il reticolo (Figura 3).

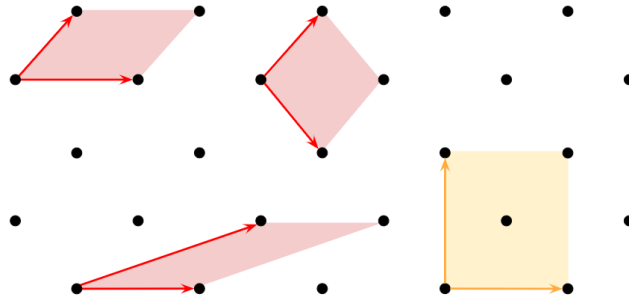


Figura 3: Esempio di reticolo bidimensionale. Se si considerano come i vettori \vec{a}_i le coppie di vettori colorate in rosso si ottiene il reticolo primitivo. Le figure colorate in rosso infatti hanno tutte la stessa area. Il reticolo generato dalla coppia di vettori in arancione invece non è primitivo, infatti non è possibile raggiungere il punto centrale con una trasformazione del tipo (2.1). Dal punto centrale, tuttavia, si vede la stessa disposizione di atomi vista anche dagli altri punti. La cella unitaria del reticolo generato dai vettori in arancione sarà quindi più grande della cella unitaria del reticolo primitivo, ma sarà composta da copie di quest'ultima.

Il potenziale efficace dovuto ad un reticolo di questo genere sarà quindi periodico nello spazio con la stessa periodicità del reticolo primitivo. Per un reticolo unidimensionale è permessa una sola direzione in cui posizionare gli atomi: le celle unitarie saranno quindi composte da atomi allineati tra loro ed i vettori \vec{a}_i si ridurranno ad un numero a chiamato, nel caso di un reticolo primitivo, passo del reticolo (Figura 4). Il potenziale efficace per un reticolo lineare avrà un periodo pari al passo del reticolo.

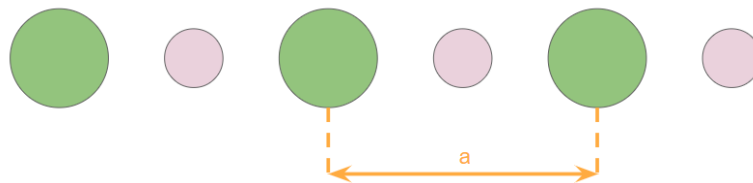


Figura 4: Esempio di sequenza di ioni per un reticolo cristallino unidimensionale. Con la lettera a è indicato il passo del reticolo, ovvero la lunghezza della sequenza minima che si ripete periodicamente.

2.2 Potenziali periodici unidimensionali

2.2.1 Caratteristiche generali

Indicando con a il passo del reticolo (Figura 4), il potenziale, essendo periodico, soddisferà la relazione:

$$U(x + a) = U(x) \quad (2.2)$$

L'equazione di Schroedinger associata al potenziale è quindi:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(w - U)\Phi = 0 \quad (2.3)$$

ove con Φ sono indicate le autofunzioni e con w gli autovalori dell'energia.

Dato che non ci sono limiti spaziali ed il reticolo si estende all'infinito, lo spettro energetico è totalmente continuo e gli autovalori w sono doppiamente degeneri. Ad ognuno di essi sono associate due autofunzioni Φ_{w1} e Φ_{w2} linearmente indipendenti, continue e limitate per $x \rightarrow \pm\infty$ e a derivata continua. Per queste autofunzioni scegliamo la normalizzazione convenzionale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{wi}^* \Phi_{w'j} dx = \delta_{ij} \delta(w - w') \quad (2.4)$$

2.2.2 L'operatore traslazione

Siccome il potenziale è periodico è interessante capire come questa proprietà si rifletta sulla funzione d'onda. Definiamo quindi l'operatore T che agisce su una funzione nel seguente modo:

$$\Phi^T(x) = \Phi(x + a) \quad (2.5)$$

in cui a è il passo del reticolo visto in precedenza. La funzione Φ^T verrà anche chiamata funzione traslata.

Nonostante il simbolo utilizzato per indicare la funzione su cui agisce l'operatore (Φ) sia lo stesso usato per denominare le autofunzioni, è importante notare che l'operatore traslazione e le sue proprietà valgono per una qualsiasi funzione generica.

L'operatore T inoltre è lineare e preserva la normalizzazione convenzionale (2.4)

Lemma 2.1. *L'operatore T è lineare e preserva la normalizzazione convenzionale (2.4)*

Dimostrazione. Iniziamo dimostrando la linearità:

$$(A\Phi + B\Xi)^T(x) = (A\Phi + B\Xi)(x + a) = A\Phi(x + a) + B\Xi(x + a) = A\Phi^T(x) + B\Xi^T(x) \quad (2.6)$$

ove si è utilizzata la linearità dello spazio delle funzioni.

Ora proseguiamo dimostrando che l'operatore T preserva la normalizzazione convenzionale:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{wi}^T(x)^* \Phi_{w'j}^T(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{wi}(x + a)^* \Phi_{w'j}(x + a) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{wi}(x)^* \Phi_{w'j}(x) dx = \delta_{ij} \delta(w - w') \end{aligned} \quad (2.7)$$

In cui è stato operato il cambio di variabile $x + a = x$, che essendo una traslazione non modifica gli estremi di integrazione quando questi sono infinito. È stata impiegata anche la relazione di normalizzazione (2.4) \square

Un'altra proprietà molto importante dell'operatore T è che se Φ è soluzione dell'equazione di Schroedinger (2.3), anche Φ^T lo è.

Lemma 2.2. *Se la funzione Φ è soluzione dell'equazione di Schroedinger (2.3) anche Φ^T lo è.*

Dimostrazione.

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi^T(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(w - U(x))\Phi^T(x) &= \frac{d^2\Phi(x + a)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(w - U(x))\Phi(x + a) \\ &= \frac{d^2\Phi(x + a)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(w - U(x + a))\Phi(x + a) = 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

in cui è stata impiegata la periodicità del potenziale (2.2) e il fatto che l'equazione di Schrodinger sia valida per ogni x , quindi anche per $x + a$.

La funzione $\Phi^T(x)$ essendo una traslazione di Φ è continua e limitata su tutto lo spazio e la sua derivata è continua, inoltre per il lemma 2.1 soddisfa la relazione di normalizzazione (2.4). \square

I lemmi 2.1 e 2.2 permettono di scegliere le autofunzioni energetiche Φ_{w1} e Φ_{w2} in modo tale che siano soddisfatte le relazioni:

$$\Phi_{w1}^T = e^{iK_w a} \Phi_{w1} \quad \Phi_{w2}^T = e^{-iK_w a} \Phi_{w2} \quad (2.9)$$

in cui a è il passo del reticolo e K_w è un numero reale dipendente dall'autovalore energetico w chiamato numero d'onda di Bloch, che convenzionalmente è fatto variare nell'intervallo $[-\pi/a, \pi/a]$.

Teorema 2.3. *È sempre possibile scegliere due funzioni Φ_{w1} e Φ_{w2} linearmente indipendenti soluzioni dell'equazione di Schrodinger (2.3) per l'autovalore w che soddisfino la relazione di normalizzazione (2.4) in modo tale che le funzioni Φ_{w1}^T e Φ_{w2}^T soddisfino:*

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

ove K_w è un numero d'onda reale dipendente dall'autovalore w che varia nell'intervallo $[-\pi/a, \pi/a]$.

Dimostrazione. Siano $\hat{\Phi}_{w1}$ e $\hat{\Phi}_{w2}$ due autofunzioni energetiche di w linearmente indipendenti, per il lemma 2.2 anche $\hat{\Phi}_{w1}^T$ e $\hat{\Phi}_{w2}^T$ lo sono. Essendo l'equazione di Schrodinger un'equazione differenziale lineare ordinaria ammette al massimo due soluzioni linearmente indipendenti per ogni autovalore w ed è possibile dunque esprimere le funzioni traslate come combinazione lineare delle soluzioni particolari:

$$\hat{\Phi}_{wi}^T = \sum_j t_{wji} \hat{\Phi}_{wj} \quad (2.10)$$

ove i coefficienti t_{wji} sono numeri complessi.

Dalla relazione di normalizzazione (2.4) si dimostra che la matrice dei coefficienti $\{t_{wji}\}$ è unitaria, infatti per il lemma 2.1 risulta:

$$\begin{aligned} \delta_{ij} \delta(w - w') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\Phi}_{wi}^* \hat{\Phi}_{w'j} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{\Phi}_{wi}^T)^* \hat{\Phi}_{w'j}^T dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_l t_{wli} \hat{\Phi}_{wl} \right)^* \left(\sum_k t_{w'kj} \hat{\Phi}_{w'k} \right) dx = \sum_{l,k} \left(t_{wli}^* t_{w'kj} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\Phi}_{wl}^* \hat{\Phi}_{w'k} dx \right) \\ &= \sum_{l,k} t_{wli}^* t_{w'kj} \delta_{lk} \delta(w - w') = \sum_l t_{wli}^* t_{w'jl} \delta(w - w') \end{aligned} \quad (2.11)$$

ove sono state usate sia la relazione (2.10) che la normalizzazione (2.4). Siccome la delta di Dirac dà supporto all'equazione solo quando $w = w'$, l'equazione (2.11) si traduce nella relazione

$$\sum_l t_{wli}^* t_{wjl} = \delta_{ij} \quad (2.12)$$

cioè la relazione di unitarietà per la matrice $\{t_{wji}\}$.

Ora consideriamo una generica soluzione Φ_w dell'equazione di Schrodinger (2.3) espressa come:

$$\Phi_w = \sum_i c_{wi} \hat{\Phi}_{wi} \quad (2.13)$$

ove i fattori c_{wi} sono numeri complessi.

Vogliamo dimostrare che esistano dei numeri complessi z di modulo unitario tali che

$$\Phi_w^T = z\Phi_w \quad (2.14)$$

Per fare ciò applichiamo l'operatore T all'equazione (2.13):

$$\Phi_w^T = \sum_i \left(c_{wi} \hat{\Phi}_{wi} \right)^T = \sum_i c_{wi} \hat{\Phi}_{wi}^T = \sum_i \left(c_{wi} \sum_j t_{wji} \hat{\Phi}_{wj} \right) \quad (2.15)$$

ove si è usata la relazione (2.10) e il fatto che l'operatore T agisce solo sulle funzioni. Eguagliando ora le equazioni (2.14) e (2.15):

$$\begin{aligned} \sum_i \left(c_{wi} \sum_j t_{wji} \hat{\Phi}_{wj} \right) &= z \sum_j c_{wj} \hat{\Phi}_{wj} \\ \sum_j \left(\sum_i c_{wi} (t_{wji} - z\delta_{ij}) \right) \hat{\Phi}_{wj} &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

siccome per ipotesi le $\hat{\Phi}_{wj}$ sono linearmente indipendenti, una loro combinazione lineare può essere nulla solo se i suoi coefficienti sono identicamente nulli, l'equazione (2.16) implica quindi:

$$\sum_i c_{wi} (t_{wji} - z\delta_{ij}) = 0 \quad (2.17)$$

cioè l'equazione degli autovalori e autovettori della matrice $\{t_{wji}\}$.

Essendo la matrice 2×2 unitaria, per il teorema spettrale ha due autovalori z_{w1} e z_{w2} non nulli di modulo unitario, inoltre gli autospazi generati dai suoi autovettori sono ortogonali.

I fattori c_{wi} dell'equazione (2.13) sono quindi le componenti di un autovettore della matrice $\{t_{wji}\}$. Siccome il teorema spettrale per una matrice unitaria 2×2 garantisce l'esistenza di due autovettori ortogonali si può estendere la (2.13) in modo da rappresentare entrambe le soluzioni:

$$\Phi_{wi} = \sum_j c_{wji} \hat{\Phi}_{wj} \quad (2.18)$$

Estendendo anche la (2.14) si ottiene:

$$\Phi_{wi}^T = z_{wi} \Phi_{wi} \quad (2.19)$$

Scegliendo i vettori \vec{c}_{w1} e \vec{c}_{w2} di modulo unitario, vale la seguente relazione:

$$\sum_l c_{wli}^* c_{wjl} = \delta_{ij} \quad (2.20)$$

La matrice dei coefficienti $\{c_{wji}\}$ è quindi unitaria.

Con questo risultato si può verificare che la normalizzazione delle soluzioni generali sia la stessa delle soluzioni particolari $\hat{\Phi}_{wi}$:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{wi}^* \Phi_{w'j} dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_l c_{wli} \hat{\Phi}_{wl} \right)^* \left(\sum_k c_{w'kj} \hat{\Phi}_{w'k} \right) dx \\
&= \sum_{l,k} \left(c_{wli}^* c_{w'kj} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\Phi}_{wl}^* \hat{\Phi}_{w'k} dx \right) = \sum_{l,k} c_{wli}^* c_{w'kj} \delta_{lk} \delta(w - w') = \sum_l c_{wli}^* c_{w'jl} \delta(w - w') \\
&= \sum_l c_{wli}^* c_{wjl} \delta(w - w') = \delta_{ij} \delta(w - w')
\end{aligned} \tag{2.21}$$

ove nel penultimo passaggio è stato utilizzato il fatto che la delta di Dirac dà supporto all'equazione solo se $w = w'$ e nell'ultimo stata usata la relazione di ortonormalità dei coefficienti c_{wji} (2.20).

Per concludere la dimostrazione occorre mostrare che gli autovalori della matrice $\{t_{wji}\}$ soddisfano la relazione $z_{w1}^* = z_{w2}$ e per fare ciò consideriamo il Wronskiano di due soluzioni generiche $W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})$. Se applichiamo l'operatore T al Wronskiano otteniamo:

$$\begin{aligned}
W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x)^T &= W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x + a) \\
&= \Phi_{w1}(x + a) \frac{d\Phi_{w2}(x + a)}{dx} - \Phi_{w2}(x + a) \frac{d\Phi_{w1}(x + a)}{dx} \\
&= z_{w1} \Phi_{w1}(x) \frac{d(z_{w2} \Phi_{w2}(x))}{dx} - z_{w2} \Phi_{w2}(x) \frac{d(z_{w1} \Phi_{w1}(x))}{dx} \\
&= z_{w1} z_{w2} \Phi_{w1}(x) \frac{d\Phi_{w2}(x)}{dx} - z_{w2} z_{w1} \Phi_{w2}(x) \frac{d\Phi_{w1}(x)}{dx} = z_{w1} z_{w2} W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x)
\end{aligned} \tag{2.22}$$

ove è stata utilizzata la relazione (2.19). Tuttavia essendo le Φ_{wi} autofunzioni il Wronskiano è costante, di conseguenza:

$$W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x)^T = W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x + a) = W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x) \tag{2.23}$$

Eguagliando le equazioni (2.22) e (2.23) si ha:

$$z_{w1} z_{w2} W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x) = W(\Phi_{w1}, \Phi_{w2})(x) \tag{2.24}$$

Quindi $z_{w1} z_{w2} = 1$ ed essendo $|z_{wi}| = 1$ si ottiene:

$$z_{w1} = z_{w2}^* \tag{2.25}$$

Ponendo quindi:

$$z_{w1} = e^{iK_w a} \quad z_{w2} = e^{-iK_w a} \tag{2.26}$$

e usando la relazione (2.19) si ottengono le relazioni (2.9). \square

A questo punto possiamo enunciare il teorema di Bloch.

Teorema 2.4. *Si può scegliere l'autofunzione energetica Φ_{wi} soluzione dell'equazione di Schroedinger per un potenziale periodico in modo che fattorizzi come:*

$$\Phi_{wi}(x) = e^{iK_w x} u_{wi}(x) \tag{2.27}$$

ove u_{wi} è una funzione periodica con lo stesso periodo del potenziale.

Dimostrazione. Definiamo la funzione $u_{wi}(x)$ come:

$$u_{wi}(x) = e^{-iK_w x} \Phi_{wi}(x) \quad (2.28)$$

l'equazione (2.27) risulta così essere identicamente soddisfatta. Per dimostrare che u_{wi} è periodica scegliamo le Φ_{wi} in modo tale che risultino soddisfatte le relazioni (2.9), ne consegue che:

$$\begin{aligned} \Phi_{wi}^T(x) &= e^{iK_w a} \Phi_{wi}(x) \\ e^{iK_w(x+a)} u_{wi}(x+a) &= e^{iK_w a} e^{iK_w(x)} u_{wi}(x) \\ u_{wi}(x+a) &= u_{wi}(x) \end{aligned} \quad (2.29)$$

La funzione u_{wi} deve quindi essere periodica. \square

Le autofunzioni energetiche risultano quindi essere onde piane parallele modulate da una componente periodica.

2.2.3 Lo spettro energetico

Le relazioni (2.9) permettono di trovare un'espressione per il numero d'onda di Bloch:

$$\cos(K_w a) = F(w) \quad (2.30)$$

con $F(w)$ data dall'equazione:

$$F(w) = \frac{W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) + W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T)}{2W(\chi_{w1}, \chi_{w2})} \quad (2.31)$$

ove χ_{w1} e χ_{w2} sono due soluzioni dell'equazione di Schroedinger (2.3) e con W è indicato il Wronskiano. La funzione $F(w)$ è inoltre indipendente dalla scelta delle funzioni χ_{wi} .

Dimostrazione. Scegliamo un'autofunzione energetica Φ_w in modo tale che soddisfi la relazione:

$$\Phi_w^T = e^{iK_w a} \Phi_w \quad (2.32)$$

La derivata soddisferà quindi la relazione:

$$\frac{d\Phi_w^T}{dx} = e^{iK_w a} \frac{d\Phi_w}{dx} \quad (2.33)$$

Per il principio di sovrapposizione possiamo scrivere la funzione Φ_w come somma delle soluzioni particolari χ_{wi} :

$$\Phi_w = \sum_j b_{wj} \chi_{wj} \quad (2.34)$$

Sostituendo l'espansione (2.34) nelle equazioni (2.32) e (2.33) otteniamo la coppia di equazioni:

$$\left\{ \begin{aligned} \sum_j b_{wj} (\chi_{wj}^T - e^{iK_w a} \chi_{wj}) &= 0 \end{aligned} \right. \quad (2.35)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \sum_j b_{wj} \left(\frac{d\chi_{wj}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{wj}}{dx} \right) &= 0 \end{aligned} \right. \quad (2.36)$$

Essendo un sistema lineare nelle incognite b_{wj} ha una soluzione non banale solo se il determinante della matrice dei coefficienti è nullo, pertanto:

$$\det \begin{pmatrix} \chi_{w1}^T - e^{iK_w a} \chi_{w1} & \chi_{w2}^T - e^{iK_w a} \chi_{w2} \\ \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{w1}}{dx} & \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} - e^{iK_w a} \frac{d\chi_{w2}}{dx} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} & \chi_{w1}^T \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} - e^{iK_w a} \chi_{w1}^T \frac{d\chi_{w2}}{dx} - e^{iK_w a} \chi_{w1} \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} + e^{2iK_w a} \chi_{w1} \frac{d\chi_{w2}}{dx} \\ & - \chi_{w2}^T \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} + e^{iK_w a} \chi_{w2}^T \chi_{w1} + e^{iK_w a} \chi_{w2} \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} - e^{2iK_w a} \chi_{w2} \frac{d\chi_{w1}}{dx} = 0 \\ & W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}^T) - e^{iK_w a} W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) - e^{iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + e^{2iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) = 0 \\ & W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) - e^{iK_w a} W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) - e^{iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + e^{2iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) = 0 \\ & e^{-iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) - W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) - W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) + e^{iK_w a} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) = 0 \\ & 2 \cos(K_w a) W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) = W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) + W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) \\ & \cos(K_w a) = \frac{W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) + W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T)}{2W(\chi_{w1}, \chi_{w2})} \end{aligned} \quad (2.38)$$

ove nel terzo passaggio è stata usata la seguente proprietà del wronskiano:

$$\begin{aligned} W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}^T)(x) &= \chi_{w1}^T(x) \frac{d\chi_{w2}^T}{dx}(x) - \chi_{w2}^T(x) \frac{d\chi_{w1}^T}{dx}(x) \\ &= \chi_{w1}(x+a) \frac{d\chi_{w2}}{dx}(x+a) - \chi_{w2}(x+a) \frac{d\chi_{w1}}{dx}(x+a) \\ &= W(\chi_{w1}, \chi_{w2})(x+a) = W(\chi_{w1}, \chi_{w2})(x) \end{aligned} \quad (2.39)$$

ed il fatto che essendo le χ_{wi} autofunzioni il loro wronskiano è costante. Per dimostrare che la funzione $F(w)$ non dipenda dalla scelta delle soluzioni particolari, consideriamo le funzioni χ_{wi} come sovrapposizione di altre due soluzioni ξ_{wj} :

$$\chi_{wi} = \sum_j p_{wij} \xi_{wj} \quad (2.40)$$

Siccome vogliamo che le soluzioni χ_{wi} rispettino la normalizzazione (2.4) la matrice dei coefficienti $\{p_{wij}\}$ deve essere unitaria (equazione (2.20)).

Sostituendo nei wronskiani dell'espressione (2.31) l'espansione (2.40) si ottengono le equazioni:

$$\begin{aligned} W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) &= \chi_{w1}^T \frac{d\chi_{w2}}{dx} - \chi_{w2} \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} \\ &= (p_{w11} \xi_{w1}^T + p_{w12} \xi_{w2}^T) (p_{w21} \frac{d\xi_{w1}}{dx} + p_{w22} \frac{d\xi_{w2}}{dx}) - (p_{w21} \xi_{w1} + p_{w22} \xi_{w2}) (p_{w11} \frac{d\xi_{w1}^T}{dx} + p_{w12} \frac{d\xi_{w2}^T}{dx}) \\ &= p_{w11} p_{w21} \xi_{w1}^T \frac{d\xi_{w1}}{dx} + p_{w11} p_{w22} \xi_{w1}^T \frac{d\xi_{w2}}{dx} + p_{w12} p_{w21} \xi_{w2}^T \frac{d\xi_{w1}}{dx} + p_{w12} p_{w22} \xi_{w2}^T \frac{d\xi_{w2}}{dx} \\ & - p_{w21} p_{w11} \xi_{w1} \frac{d\xi_{w1}^T}{dx} - p_{w21} p_{w12} \xi_{w1} \frac{d\xi_{w2}^T}{dx} - p_{w22} p_{w11} \xi_{w2} \frac{d\xi_{w1}^T}{dx} - p_{w22} p_{w12} \xi_{w2} \frac{d\xi_{w2}^T}{dx} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) &= p_{w11} p_{w21} \xi_{w1} \frac{d\xi_{w1}^T}{dx} + p_{w11} p_{w22} \xi_{w1} \frac{d\xi_{w2}^T}{dx} + p_{w12} p_{w21} \xi_{w2} \frac{d\xi_{w1}^T}{dx} + p_{w12} p_{w22} \xi_{w2} \frac{d\xi_{w2}^T}{dx} \\ & - p_{w21} p_{w11} \xi_{w1}^T \frac{d\xi_{w1}}{dx} - p_{w21} p_{w12} \xi_{w1}^T \frac{d\xi_{w2}}{dx} - p_{w22} p_{w11} \xi_{w2}^T \frac{d\xi_{w1}}{dx} - p_{w22} p_{w12} \xi_{w2}^T \frac{d\xi_{w2}}{dx} \end{aligned} \quad (2.42)$$

Ottenuta dalla (2.41) portando l'apice T sulla funzione χ_{w2}

$$\begin{aligned}
W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) &= p_{w11}p_{w21}\xi_{w1}\frac{d\xi_{w1}}{dx} + p_{w11}p_{w22}\xi_{w1}\frac{d\xi_{w2}}{dx} + p_{w12}p_{w21}\xi_{w2}\frac{d\xi_{w1}}{dx} + p_{w12}p_{w22}\xi_{w2}\frac{d\xi_{w2}}{dx} \\
&\quad - p_{w21}p_{w11}\xi_{w1}\frac{d\xi_{w1}}{dx} - p_{w21}p_{w12}\xi_{w1}\frac{d\xi_{w2}}{dx} - p_{w22}p_{w11}\xi_{w2}\frac{d\xi_{w1}}{dx} - p_{w22}p_{w12}\xi_{w2}\frac{d\xi_{w2}}{dx} \\
&= \xi_{w1}\frac{d\xi_{w2}}{dx}(p_{w11}p_{w22} - p_{w21}p_{w12}) + \xi_{w2}\frac{d\xi_{w1}}{dx}(p_{w12}p_{w21} - p_{w22}p_{w11}) \\
&= \pm\xi_{w1}\frac{d\xi_{w2}}{dx} \mp \xi_{w2}\frac{d\xi_{w1}}{dx} = W(\xi_{w1}, \xi_{w2})
\end{aligned} \tag{2.43}$$

ove il primo passaggio è stato ottenuto togliendo l'apice T dalla (2.41) e nell'ultimo è stato usato il fatto che il determinante di una matrice unitaria è ± 1 .

Sommando la (2.42) alla (2.41) si ottiene:

$$\begin{aligned}
W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) + W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) &= (p_{w11}p_{w22} - p_{w21}p_{w12})\xi_{w1}^T\frac{d\xi_{w2}}{dx} + (p_{w12}p_{w21} - p_{w22}p_{w11})\xi_{w2}^T\frac{d\xi_{w1}}{dx} + \\
&\quad (p_{w11}p_{w22} - p_{w21}p_{w12})\xi_{w1}\frac{d\xi_{w2}^T}{dx} + (p_{w12}p_{w21} - p_{w22}p_{w11})\xi_{w2}\frac{d\xi_{w1}^T}{dx} \\
&= \pm\xi_{w1}^T\frac{d\xi_{w2}}{dx} \mp \xi_{w2}^T\frac{d\xi_{w1}}{dx} \pm \xi_{w1}\frac{d\xi_{w2}^T}{dx} \mp \xi_{w2}\frac{d\xi_{w1}^T}{dx} = \pm(W(\xi_{w1}^T, \xi_{w2}) + W(\xi_{w1}, \xi_{w2}^T))
\end{aligned} \tag{2.44}$$

Combinando le equazioni (2.43) e (2.44) con la (2.31) si dimostra l'indipendenza di $F(w)$ dalle soluzioni scelte. \square

Siccome il coseno è una funzione limitata nell'intervallo $[-1, 1]$, l'equazione (2.30) implica che gli unici valori di w accettabili siano quelli tali per cui la $F(w)$ risulta anch'essa limitata nell'intervallo $[-1, 1]$.

Per convenienza studiamo la funzione $F(w)$ parametrizzando l'autovalore energetico in funzione del numero d'onda cinematico k utilizzando la relazione:

$$w = w_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + w_0 \quad k > 0 \tag{2.45}$$

ove w_0 rappresenta l'autovalore di minima energia.

Anche tutte le altre quantità dipendenti da w diventano quantità dipendenti da k , per cui:

$$K_w = K_k \tag{2.46}$$

$$\chi_{wi} = \chi_{ki} \tag{2.47}$$

Poniamo anche $F(w) = F(ka)$ in questo modo l'equazione (2.30) diventa $\cos(K_k a) = F(ka)$. Di conseguenza i valori del numero d'onda ammessi sono quelli che permettono alla funzione $F(ka)$ di rimanere dentro l'intervallo $[-1, 1]$. Considerando l'equazione (2.30) si può notare come, se un valore di ka è permesso, allora l'equazione è soddisfatta sia da un certo $K_k a$ che da $K_k a + 2\pi n$. Possiamo quindi estendere la funzione K_k a tutti i valori positivi associando ad un valore di ka appartenente all'intervallo $[n\pi, (n+1)\pi]$ un valore di $K_k a$ nell'intervallo $[n\pi, (n+1)\pi]$, in modo tale che per il primo valore ammesso di ka per l'intervallo n -esimo il corrispondente valore di $K_k a$ sia $n\pi$ e all'ultimo valore ammesso di ka per lo stesso intervallo corrisponda $K_k a = (n+1)\pi$. In questo modo creiamo una corrispondenza biunivoca tra i valori di ka e di $K_k a$. Facendo ciò lo spettro energetico risulta quindi essere composto da bande

all'interno delle quali il numero d'onda, e quindi anche l'autovalore energetico w , varia con continuità (Figura 5).

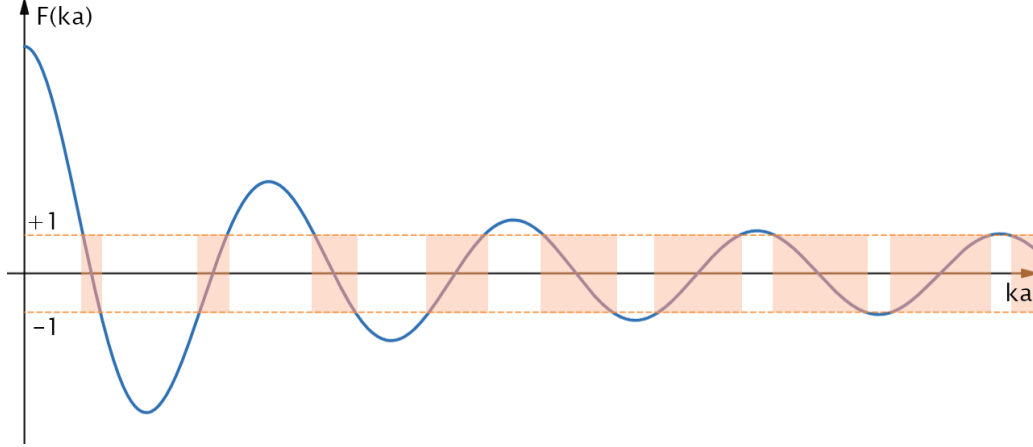


Figura 5: Grafico di una possibile funzione $F(ka)$ in funzione di ka . Imponendo la restrizione dei valori di $F(ka)$ nell'intervallo $[-1, 1]$ si ottiene una distribuzione di k che varia con continuità all'interno di intervalli disgiunti, da cui lo spettro energetico a bande.

Si può studiare inoltre il limite alle alte energie, in cui si considera il potenziale come una piccola perturbazione della dinamica di particella libera, di conseguenza le autofunzioni energetiche sono assimilabili ad onde piane e le soluzioni particolari si scrivono come:

$$\chi_{w1} \approx e^{ikx} \quad (2.48)$$

$$\chi_{w2} \approx e^{-ikx} \quad (2.49)$$

e vale la relazione:

$$\cos(K_w a) \approx \cos(ka) \quad (2.50)$$

che implica:

$$K_w \approx k \quad (2.51)$$

Dimostrazione. Inseriamo le espansioni (2.48) e (2.49) nei Wronskiani dell'equazione (2.31):

$$W(\chi_{w1}, \chi_{w2}) = \chi_{w1} \frac{d\chi_{w2}}{dx} - \chi_{w2} \frac{d\chi_{w1}}{dx} \approx -ike^{ikx} e^{-ikx} - ike^{-ikx} e^{ikx} \approx -2ik \quad (2.52)$$

$$W(\chi_{w1}^T, \chi_{w2}) = \chi_{w1}^T \frac{d\chi_{w2}}{dx} - \chi_{w2} \frac{d\chi_{w1}^T}{dx} \approx -ike^{ika} e^{ikx} e^{-ikx} - ike^{-ikx} e^{ikx} e^{ika} \approx -2ike^{ika} \quad (2.53)$$

$$W(\chi_{w1}, \chi_{w2}^T) = \chi_{w1} \frac{d\chi_{w2}^T}{dx} - \chi_{w2}^T \frac{d\chi_{w1}}{dx} \approx -ike^{ikx} e^{-ikx} e^{-ika} - ike^{-ikx} e^{-ika} e^{ikx} \approx -2ike^{-ika} \quad (2.54)$$

Inserendo queste espansioni nella (2.31) si ottiene:

$$F(ka) \approx \frac{-2ike^{ika} - 2ike^{-ika}}{-4ik} \approx \frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2} \approx \cos(ka) \quad (2.55)$$

Inserendo ora questa espressione nella 2.30 si completa la dimostrazione. \square

Nel limite alle alte energie quindi la funzione $F(ka)$ sarà limitata nell'intervallo $[-1, 1]$ per ogni valore di k , quindi tutti i valori di k saranno permessi. Lo spettro energetico da quando questo limite è valido avrà quindi un'unica banda che si estende fino all'infinito come previsto dal

modello della particella libera.

Un altro modo di vedere lo spettro è quello di esprimere le bande energetiche in funzione del numero d'onda di Bloch K (Figura 6). Per fare ciò estendiamo il numero d'onda cinematico k a tutti i valori reali, entrando nell'espressione di w in maniera quadratica questa scelta non modifica le bande. La funzione $\cos(Ka)$ è periodica di periodo $\frac{2\pi}{a}$, quindi per $K = \frac{n\pi}{a}$ assume i valori $(-1)^n$. La funzione $F(ka)$ è una funzione continua oscillante che per valori di k piccoli assume valori al di fuori dell'intervallo $[-1, 1]$. Come visibile in figura 5 escludendo la prima intersezione della funzione $F(ka)$ con l'intervallo $[-1, 1]$ che attraversa la retta $y = 1$ in un punto solo, le successive intersezioni prevedono due punti di attraversamento delle rette $y = 1$ o $y = -1$ prima di attraversare la retta di segno opposto. Per $n \neq 0$ quindi per ogni valore di $K = \frac{n\pi}{a}$ corrispondono due valori di $F(ka)$ separati dal gap energetico (Figura 6).

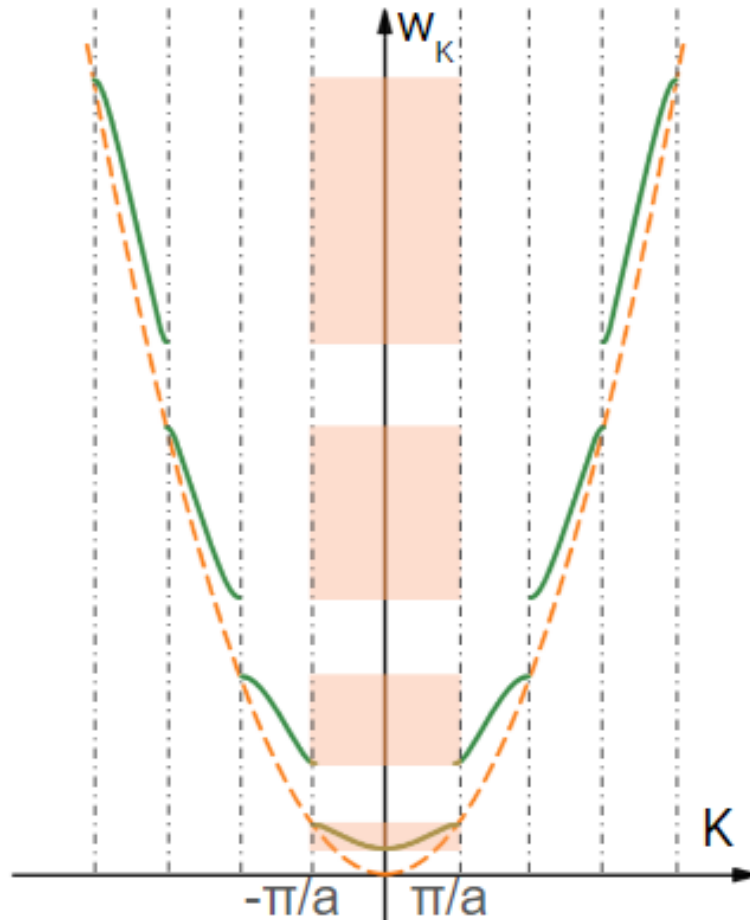


Figura 6: Valore dell'autovalore energetico w_k in funzione del numero d'onda di Bloch K . In arancione sono raffigurate le bande energetiche, mentre in verde è rappresentata la funzione w_K in funzione di K . La linea tratteggiata arancione rappresenta l'energia di una particella libera $\frac{\hbar^2 K^2}{2m}$. Si può vedere che ad ogni $K = \frac{n\pi}{a}$ con $n \neq 0$ corrispondano due valori di $w_K(K)$ e che per $K \rightarrow \infty$ il valore della funzione $w_K(K)$ approssima sempre meglio la parabola corrispondente all'energia di particella libera, in accordo con il limite alle alte energie.

3 Modelli di potenziali unidimensionali

3.1 Il modello di Kroenig-Penney

3.1.1 Caratteristiche generali

Il modello di Kroenig-Penney [6][7] si basa sull'approssimazione del potenziale periodico con una sequenza di buche e barriere di potenziale. Il potenziale sarà quindi costituito da zone di potenziale nullo alternate a zone di potenziale costante non nullo (Figura 7), e si può modellizzare secondo le relazioni:

$$U(x) = U_0 \quad nc - b < x < nc \quad (3.1a)$$

$$U(x) = 0 \quad nc < x < nc + a \quad (3.1b)$$

ove c è il passo del reticolo, a è la lunghezza delle zone a potenziale nullo, b è la lunghezza delle zone a potenziale costante di valore U_0 e n è un numero intero.

Un potenziale di questo tipo è periodico di periodo c , si ha quindi:

$$U(x + c) = U(x) \quad (3.2)$$

Dimostrazione. Consideriamo inizialmente le zone a potenziale costante, queste zone secondo l'equazione (3.1a) appartengono all'intervallo:

$$nc - b < x < nc \quad (3.3)$$

Analogamente, traslando di c , si avrà:

$$(n + 1)c - b < x + c < (n + 1)c \quad (3.4)$$

Siccome l'intervallo nell'equazione (3.1a) è definito con n intero, anche l'intervallo $[(n + 1)c - b, (n + 1)c]$ dell'equazione (3.4) sarà dello stesso tipo, quindi al suo interno il potenziale sarà costante. Di conseguenza:

$$U(x + c) = U_0 = U(x) \quad nc - b < x < nc \quad (3.5)$$

Ripetendo il procedimento in maniera analoga per le zone a potenziale nullo si ottiene la relazione:

$$U(x + c) = 0 = U(x) \quad nc < x < nc + a \quad (3.6)$$

da cui segue la periodicità del potenziale su tutta la retta con periodo c (equazione (3.2)). \square

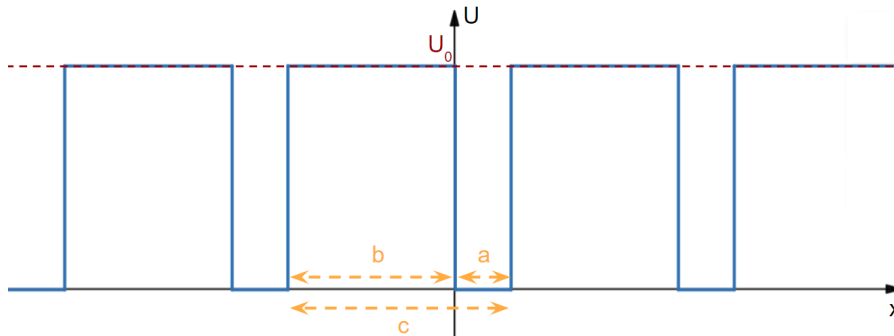


Figura 7: Potenziale di Kroenig-Penney, con c è indicato il passo del reticolo, con b la lunghezza delle zone a potenziale U_0 , mentre con a la lunghezza delle zone a potenziale nullo

3.1.2 Lo spettro energetico

Consideriamo ora il problema di Schroedinger per il potenziale (3.1), l'equazione (2.3) si traduce quindi nella coppia di equazioni:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (w - U_0) \Phi = 0 \quad nc - b < x < nc \quad (3.7a)$$

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2mw}{\hbar^2} \Phi = 0 \quad nc < x < nc + a \quad (3.7b)$$

Ponendo:

$$k = \frac{\sqrt{2mw}}{\hbar} \quad (3.8a)$$

$$k' = \frac{\sqrt{2m(w - U_0)}}{\hbar} \quad (3.8b)$$

la funzione Φ , come soluzione di un'equazione differenziale lineare del secondo ordine avrà la forma:

$$\Phi(x) = A_n e^{ik'(x-nc)} + B_n e^{-ik'(x-nc)} \quad nc - b < x < nc \quad (3.9a)$$

$$\Phi(x) = C_n e^{ik(x-nc)} + D_n e^{-ik(x-nc)} \quad nc < x < nc + a \quad (3.9b)$$

La funzione Φ e la sua derivata devono inoltre essere continue nei punti di discontinuità del potenziale:

$$\Phi(nc - b + 0) = \Phi(nc - b - 0) \quad (3.10a)$$

$$\frac{d\Phi(nc - b + 0)}{dx} = \frac{d\Phi(nc - b - 0)}{dx} \quad (3.10b)$$

quando $x = nc - b$

$$\Phi(nc + 0) = \Phi(nc - 0) \quad (3.10c)$$

$$\frac{d\Phi(nc + 0)}{dx} = \frac{d\Phi(nc - 0)}{dx} \quad (3.10d)$$

quando $x = nc$
ove è stato posto

$$\Phi(a \pm 0) = \lim_{x \rightarrow a^\pm} \Phi(x) \quad (3.11)$$

Imponendo le condizioni (3.10c) e (3.10d) otteniamo la coppia di equazioni:

$$\begin{cases} C_n + D_n = A_n + B_n & (3.12) \\ ik'A_n - ik'B_n = ikC_n - ikD_n & (3.13) \end{cases}$$

che, sommandole e sottraendole, forniscono un'espressione per i coefficienti C_n e D_n in funzione dei coefficienti A_n e B_n :

$$C_n = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k'}{k}\right) A_n + \left(1 - \frac{k'}{k}\right) B_n \right] \quad (3.14a)$$

$$D_n = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k'}{k}\right) A_n + \left(1 + \frac{k'}{k}\right) B_n \right] \quad (3.14b)$$

Sostituendo queste espressioni nell'equazione (3.9b) otteniamo:

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k'}{k}\right) A_n + \left(1 - \frac{k'}{k}\right) B_n \right] e^{ik(x-nc)} + \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k'}{k}\right) A_n + \left(1 + \frac{k'}{k}\right) B_n \right] e^{-ik(x-nc)} \\ &= \frac{1}{2} (A_n + B_n) (e^{ik(x-nc)} + e^{-ik(x-nc)}) + \frac{1}{2} \frac{k'}{k} (A_n - B_n) (e^{ik(x-nc)} - e^{-ik(x-nc)}) \\ &= (A_n + B_n) \cos(k(x-nc)) + \frac{ik'}{k} (A_n - B_n) \sin(k(x-nc)) \quad nc < x < nc + a \end{aligned} \quad (3.15)$$

Per imporre le condizioni a contorno (3.10a) e (3.10b) consideriamo che essendo $c = a + b$ il punto $nc - b$ corrisponde al punto $(n-1)c + a$. Calcoliamo quindi la funzione (3.9a) in $nc - b$ e la funzione (3.15) in $(n-1)c + a$ sostituendo in essa le n con $n-1$. Eguagliamo quindi le funzioni così ottenute:

$$\begin{aligned} A_n e^{ik'((nc-b)-nc)} + B_n e^{-ik'((nc-b)-nc)} &= (A_{n-1} + B_{n-1}) \cos(k((n-1)c + a - (n-1)c)) \\ &+ \frac{ik'}{k} (A_{n-1} - B_{n-1}) \sin(k((n-1)c + a - (n-1)c)) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Ottenendo così l'equazione:

$$A_n e^{-ik'b} + B_n e^{ik'b} = (A_{n-1} + B_{n-1}) \cos(ka) + \frac{ik'}{k} (A_{n-1} - B_{n-1}) \sin(ka) \quad (3.17)$$

Uguagliando allo stesso modo le derivate prime si ha:

$$\begin{aligned} ik' A_n e^{ik'((nc-b)-nc)} - ik' B_n e^{-ik'((nc-b)-nc)} &= -k (A_{n-1} + B_{n-1}) \sin(k((n-1)c + a - (n-1)c)) \\ &+ ik' (A_{n-1} - B_{n-1}) \cos(k((n-1)c + a - (n-1)c)) \end{aligned} \quad (3.18)$$

da cui:

$$A_n e^{-ik'b} - B_n e^{ik'b} = (A_{n-1} - B_{n-1}) \cos(ka) + \frac{ik}{k'} (A_{n-1} + B_{n-1}) \sin(ka) \quad (3.19)$$

Sommando e sottraendo le equazioni (3.17) e (3.19) si ottengono delle espressioni per i coefficienti A_n e B_n in funzione di A_{n-1} e B_{n-1} :

$$\begin{cases} A_n = \left[\cos(ka) + \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{ik'b} A_{n-1} + \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{ik'b} B_{n-1} & (3.20a) \\ B_n = \left[\cos(ka) - \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{-ik'b} B_{n-1} + \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} - \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) e^{-ik'b} A_{n-1} & (3.20b) \end{cases}$$

Stabiliamo ora un'altra relazione indipendente tra i coefficienti A_n e B_n e A_{n-1} e B_{n-1} . Per fare ciò consideriamo che l'espressione $(n-1)c - b < x < (n-1)c$ è equivalente a $nc - b < x + c < nc$ e che per le relazioni (2.9) si ha:

$$\Phi(x+c) = e^{\pm iK_k c} \Phi(x) \quad (3.21)$$

Tenendo conto del fatto che ora il passo del reticolo è c e che sono state usate le relazioni (2.46) per esprimere w in funzione di k .

Possiamo ora ottenere la funzione $\Phi(x+c)$ dalla funzione $\Phi(x)$ nell'intervallo $(n-1)c - b < x < (n-1)c$ applicando ad essa la relazione (3.21), poi procediamo ad uguagliare la funzione così ottenuta con la funzione $\Phi(x+c)$ nell'intervallo $nc - b < x+c < nc$:

$$e^{\pm iK_k c} \left[A_{n-1} e^{ik'(x-(n-1)c)} + B_{n-1} e^{-ik'(x-(n-1)c)} \right] = A_n e^{ik'(x+c-nc)} + B_n e^{-ik'(x+c-nc)} \quad (3.22)$$

da cui:

$$A_n = A_{n-1} e^{\pm iK_k c} \quad (3.23a)$$

$$B_n = B_{n-1} e^{\pm iK_k c} \quad (3.23b)$$

Sostituendo le relazioni (3.23) nelle (3.20) si ottiene la coppia di equazioni:

$$\left\{ \left[\cos(ka) + \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{ik'b} - e^{\pm iK_k c} \right\} A_{n-1} + \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{ik'b} B_{n-1} = 0 \quad (3.24a)$$

$$- \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{-ik'b} A_{n-1} + \left\{ \left[\cos(ka) - \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{-ik'b} - e^{\pm iK_k c} \right\} B_{n-1} = 0 \quad (3.24b)$$

che, essendo un sistema lineare nelle incognite A_{n-1} e B_{n-1} ha una soluzione non banale solo se il determinante della matrice dei coefficienti è nullo:

$$\left\{ \left[\cos(ka) + \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{ik'b} - e^{\pm iK_k c} \right\} \times \left\{ \left[\cos(ka) - \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{-ik'b} - e^{\pm iK_k c} \right\} + \left\{ \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{ik'b} \right\} \left\{ \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right) \sin(ka) e^{-ik'b} \right\} = 0 \quad (3.25)$$

da cui:

$$\begin{aligned} & \cos^2(ka) + \frac{1}{4} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right)^2 \sin^2(ka) + e^{\pm 2iK_k c} - \left[\cos(ka) - \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{-ik'b} e^{\pm iK_k c} \\ & - \left[\cos(ka) + \frac{i}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \right] e^{ik'b} e^{\pm iK_k c} - \frac{1}{4} \left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k} \right)^2 \sin^2(ka) \\ & = 1 + e^{\pm 2iK_k c} - 2e^{\pm iK_k c} \cos(ka) \cos(k'b) + e^{\pm iK_k c} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \sin(k'b) = 0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

ove nell'ultimo passaggio sono state impiegate le formule di Eulero per trasformare gli esponenziali in seni e coseni

Dividendo ora per $e^{\pm iK_k c}$ e applicando le relazioni di Eulero si ricava l'equazione:

$$\cos(K_k c) = \cos(ka) \cos(k'b) - \frac{1}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) \sin(ka) \sin(k'b) \quad (3.27)$$

ovvero l'equazione (2.30) per il potenziale di Kroenig-Penney. Lo spettro a cui dà origine è visibile in Figura 8.

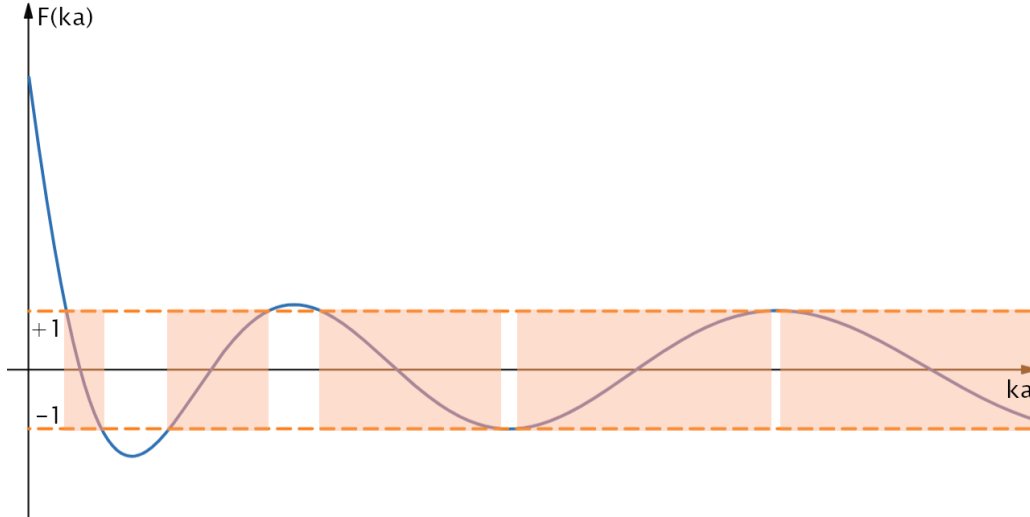


Figura 8: Spettro a bande per un potenziale di Kroenig-Penney. Con $F(ka)$ è indicato il lato destro dell'equazione (3.27). Lo spettro a bande è stato ottenuto sempre intersecando i valori di $F(ka)$ con l'intervallo $[-1, 1]$

3.2 Il modello del pettine di Dirac

Un altro modello di potenziale periodico è quello costituito da una successione periodica di delte di Dirac distanti tra loro a : questa funzione prende il nome di "pettine di Dirac" ed è rappresentata in figura 9.

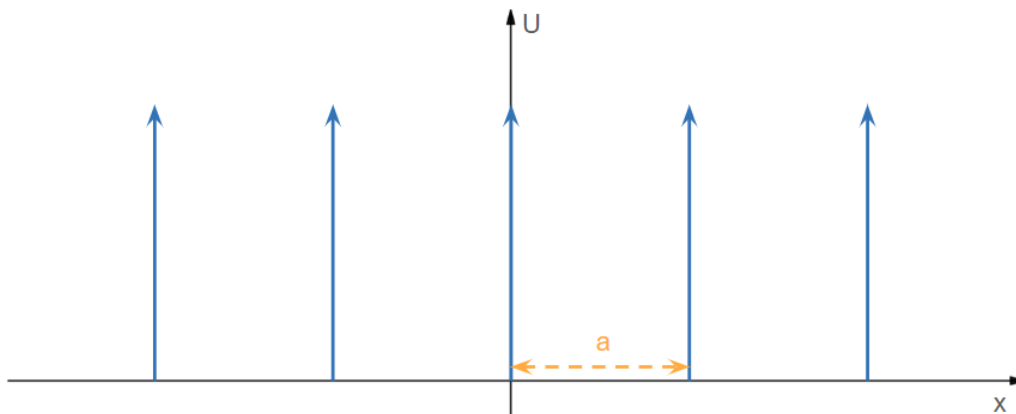


Figura 9: Potenziale periodico per il modello del pettine di Dirac. Le barriere di potenziale sono funzioni delta di Dirac poste ad una distanza a tra loro lungo tutta la retta reale. La zona tra le barriere è a potenziale nullo.

Il potenziale in questo caso è dato dall'equazione:

$$U(x) = \frac{\hbar^2 \Omega}{m} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x + na) \quad (3.28)$$

ove Ω è un parametro che rappresenta la "forza" del potenziale.

L'equazione di Schroedinger (2.3) per un potenziale di questo genere si scrive:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \left(k^2 - 2\Omega \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x+na) \right) \Phi = 0 \quad (3.29)$$

in cui è stata utilizzata la relazione (3.8a).

Considerando che la delta di Dirac ha supporto solo quando $x = na$ per $x \neq na$ l'equazione diventa:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + k^2\Phi = 0 \quad (3.30)$$

ammette quindi una soluzione della forma:

$$\Phi(x) = A_n e^{ik(x-na)} + B_n e^{-ik(x-na)} \quad na < x < (n+1)a \quad (3.31)$$

La funzione d'onda Φ deve soddisfare le condizioni a contorno:

$$\Phi(na+0) = \Phi(na-0) \quad (3.32a)$$

$$\frac{d\Phi(na+0)}{dx} - \frac{d\Phi(na-0)}{dx} = 2\Omega [\Phi(na-0)] \quad (3.32b)$$

ove la condizione sulla derivata prima è ottenuta in Appendice A.

La continuità di Φ implica:

$$A_n + B_n = A_{n-1} e^{ika} + B_{n-1} e^{-ika} \quad (3.33)$$

mentre la condizione sulla derivata fornisce la relazione:

$$ikA_n - ikB_n - ikA_{n-1} e^{ika} + ikB_{n-1} e^{-ika} = 2\Omega (A_{n-1} e^{ika} + B_{n-1} e^{-ika}) \quad (3.34)$$

che si semplifica in:

$$A_n - B_n = A_{n-1} e^{ika} \left(\frac{2\Omega}{ik} + 1 \right) + B_{n-1} e^{-ika} \left(\frac{2\Omega}{ik} - 1 \right) \quad (3.35)$$

sommando e sottraendo le equazioni (3.33) e (3.35) si possono esprimere i coefficienti A_n e B_n in funzione dei coefficienti A_{n-1} e B_{n-1} :

$$\begin{cases} A_n = A_{n-1} e^{ika} \left(1 + \frac{\Omega}{ik} \right) + B_{n-1} e^{-ika} \frac{\Omega}{ik} \end{cases} \quad (3.36a)$$

$$\begin{cases} B_n = -A_{n-1} e^{ika} \frac{\Omega}{ik} + B_{n-1} e^{-ika} \left(1 - \frac{\Omega}{ik} \right) \end{cases} \quad (3.36b)$$

si possono trovare delle altre relazioni, indipendenti da quelle espresse dalle equazioni (3.36), tra i coefficienti A_n e A_{n-1} e B_n e B_{n-1} . Si può notare come gli intervalli $(n-1)a < x < na$ e $(na) < x+a < (n+1)a$ siano equivalenti. Si può calcolare la funzione $\Phi(x+a)$ applicando le relazioni (2.9) alla funzione $\Phi(x)$ nel primo intervallo e porla uguale alla funzione $\Phi(x+a)$ calcolata nel secondo intervallo:

$$e^{\pm iK_k a} [A_{n-1} e^{ik(x-(n-1)a)} + B_{n-1} e^{-ik(x-(n-1)a)}] = A_n e^{ik(x+a-na)} + B_n e^{-ik(x+a-na)} \quad (3.37)$$

da cui:

$$\begin{aligned} A_n &= A_{n-1} e^{\pm iK_k a} \\ B_n &= B_{n-1} e^{\pm iK_k a} \end{aligned} \quad (3.38)$$

Inserendo ora le relazioni (3.38) nelle equazioni (3.36) si ottiene:

$$\begin{cases} A_{n-1}e^{\pm iK_k a} = \left(1 + \frac{\Omega}{ik}\right) A_{n-1}e^{ika} + \frac{\Omega}{ik} B_{n-1}e^{-ika} \end{cases} \quad (3.39a)$$

$$\begin{cases} B_{n-1}e^{\pm iK_k a} = -\frac{\Omega}{ik} A_{n-1}e^{ika} + \left(1 - \frac{\Omega}{ik}\right) B_{n-1}e^{-ika} \end{cases} \quad (3.39b)$$

$$\begin{cases} A_{n-1} \left[\left(1 + \frac{\Omega}{ik}\right) e^{ika} - e^{\pm iK_k a} \right] + \frac{\Omega}{ik} B_{n-1}e^{-ika} = 0 \end{cases} \quad (3.39c)$$

$$\begin{cases} -\frac{\Omega}{ik} A_{n-1}e^{ika} + B_{n-1} \left[\left(1 - \frac{\Omega}{ik}\right) e^{-ika} - e^{\pm iK_k a} \right] = 0 \end{cases} \quad (3.39d)$$

Essendo un sistema lineare nelle incognite A_{n-1} e B_{n-1} ha una soluzione non banale se e solo se il determinante della matrice dei coefficienti è nullo, quindi:

$$\left[\left(1 + \frac{\Omega}{ik}\right) e^{ika} - e^{\pm iK_k a} \right] \left[\left(1 - \frac{\Omega}{ik}\right) e^{-ika} - e^{\pm iK_k a} \right] - \frac{\Omega^2}{k^2} = 0 \quad (3.40)$$

Sviluppando il lato sinistro si ottiene:

$$\cos(K_k a) = \cos(ka) + \frac{\Omega}{k} \sin(ka) \quad (3.41)$$

Lo spettro a cui da origine è rappresentato in figura 10.

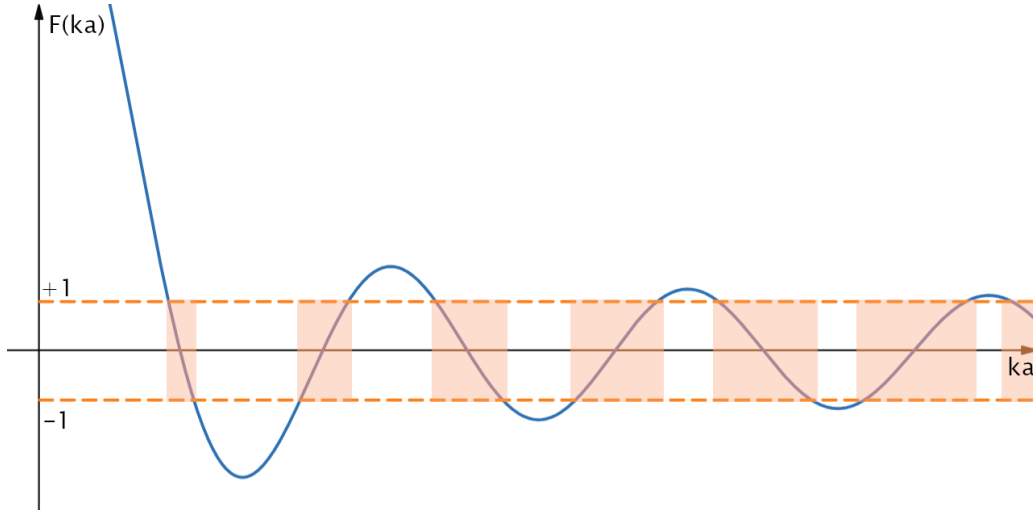


Figura 10: Spettro a bande per un potenziale del modello di pettine di Dirac. Con $F(ka)$ è indicato il lato destro dell'equazione (3.41). Lo spettro a bande è stato ottenuto intersecando i valori di $F(ka)$ con l'intervallo $[-1, 1]$. Lo spettro in figura è stato ottenuto considerando $\Omega a = 10$. Nonostante il grafico per $ka \rightarrow 0$ non rientri in figura valore di $F(0)$ è comunque finito.

3.3 Il limite di potenziale infinito e barriera stretta per il modello di Kroenig-Penney

Dal modello di Kroenig-Penney si può estrarre un altro modello per un potenziale periodico prendendo i limiti $U_0 \rightarrow +\infty$ e $b \rightarrow 0$ con il vincolo che $U_0 b$ sia finito e fissato, che implica anche $k'^2 b$ finito e fissato [8].

Ponendo:

$$\lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ U_0 \rightarrow \infty}} \frac{k'^2 a b}{2} = -P \quad P \geq 0 \quad (3.42)$$

L'equazione (3.27) diventa:

$$\cos(K_k a) = P \frac{\sin(ka)}{ka} + \cos(ka) \quad (3.43)$$

P inoltre non dipende da w .

Dimostrazione. Siccome $k'^2 b$ è finito $k'b$ tenderà a 0, possiamo quindi espandere $\sin(k'b)$ e $\cos(k'b)$ presenti nell'equazione (3.27) al primo ordine della serie di Taylor:

$$\cos(k'b) \approx 1 \quad (3.44a)$$

$$\sin(k'b) \approx k'b \quad (3.44b)$$

e l'equazione (3.27) diventa quindi:

$$\begin{aligned} \cos(K_k c) &\approx \cos(ka) - \frac{1}{2} \left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \right) k'b \sin(ka) \approx \cos(ka) - \left(\frac{k'^2 b}{2k} + \frac{kb}{2} \right) \sin(ka) \\ &\approx \cos(ka) + P \frac{\sin(ka)}{ka} \end{aligned} \quad (3.45)$$

ove sono stati eseguiti i limiti per $U_0 \rightarrow \infty$ e $b \rightarrow 0$ ed è stata utilizzata la relazione (3.42). Considerando che $c = a + b$ nel limite $b \rightarrow 0$ si riduce a $c = a$ si ottiene l'equazione (3.43). Per dimostrare che P non dipenda da w consideriamo il limite (3.42):

$$P = - \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ U_0 \rightarrow \infty}} \frac{k'^2 ab}{2} = - \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ U_0 \rightarrow \infty}} \frac{2m(w - U_0) ab}{\hbar^2} \frac{ab}{2} \approx \frac{mU_0 ab}{\hbar^2} \quad (3.46)$$

ove nel secondo passaggio è stata usata l'equazione (3.8b) e nell'ultimo passaggio è stato rimosso il termine contenente w applicando il limite $b \rightarrow 0$. Il prodotto $U_0 b$ è invece finito per ipotesi. \square

3.3.1 Legame col modello del pettine di Dirac

Si può notare come il risultato ottenuto in questo limite sia formalmente analogo a quello ottenuto tramite il modello del pettine di Dirac, infatti se nell'equazione (3.41) si pone $\Omega = \frac{mU_0 b}{\hbar^2}$ si ha $\Omega a = P$ e l'equazione (3.41) risulta uguale all'equazione (3.46). Tuttavia il legame tra i due modelli è più profondo; per analizzarlo meglio esprimiamo il potenziale (3.1) del modello di Kroenig-Penney come:

$$U(x) = U_0 \theta(x - nc) \theta(b - x + nc) \quad nc \leq x < (n+1)c \quad (3.47)$$

ove con $\theta(x)$ si intende la funzione a gradino di Heaviside definita come:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{cases} \quad (3.48)$$

$$(3.49)$$

Moltiplicando e dividendo per b il potenziale diventa:

$$U(x) = U_0 b \cdot \frac{1}{b} \theta(x - nc) \theta(b - x + nc) \quad nc \leq x < (n+1)c \quad (3.50)$$

Si può riconoscere nel fattore $\frac{1}{b} \theta(x - nc) \theta(b - x + nc)$ l'area di un rettangolo di base b e altezza $\frac{1}{b}$. Prendendo il limite per $b \rightarrow 0$ questo rettangolo diventerà sempre più stretto e sempre più alto, ma la sua area sarà sempre costante e pari a 1, tenderà quindi ad una delta di Dirac

posizionata sul punto di ascissa nc . Se si mantiene U_0b fissato e finito e gli si assegna il valore $\frac{\hbar^2\Omega}{m}$ nel limite $U_0 \rightarrow \infty$ e $b \rightarrow 0$ il potenziale (3.47) diventa:

$$U(x) = \frac{\hbar^2\Omega}{m}\delta(x - na) \quad na \leq x < (n+1)a \quad (3.51)$$

ove è stato sostituito c con a perchè nel limite $b \rightarrow 0$ c tende ad a essendo $c = a + b$. Si può notare come l'espressione così ottenuta sia analoga a quella del potenziale per il modello del pettine di Dirac (equazione (3.41)). Il potenziale modello del pettine di Dirac è quindi il limite del potenziale del modello di Kroenig-Penney nell'approssimazione di potenziale infinito e barriera stretta.

3.3.2 Lo spettro energetico

L'equazione (3.43) è la funzione (2.30) per un potenziale di Kroenig-Penney nell'approssimazione $U_0 \rightarrow \infty$, $b \rightarrow 0$, U_0b costante e fissato, lo spettro da essa generato è visibile in Figura 11.

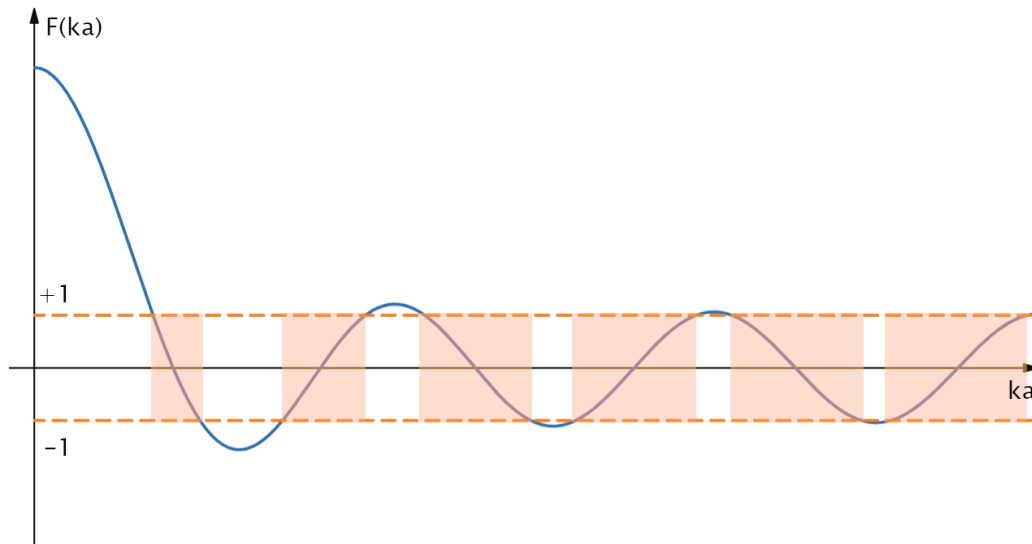


Figura 11: Spettro a bande per un potenziale di Kroenig-Penney nell'approssimazione $U_0 \rightarrow \infty$, $b \rightarrow 0$ con U_0b costante. Con $F(ka)$ è stato indicato il lato destro dell'equazione (3.43). Lo spettro a bande è stato sempre ottenuto intersecando i valori di $F(ka)$ con l'intervallo $[-1, 1]$. La figura è stata ottenuta ponendo $P = \frac{3\pi}{2}$

Ora osserviamo come cambiano le bande energetiche al variare del parametro P . Nel limite $P \rightarrow 0$ in virtù dell'equazione (3.46) anche il potenziale U_0 tenderà a 0 diventando una piccola perturbazione del moto di particella libera, la situazione sarà quindi analoga a quella del limite di alte energie. L'equazione (3.43) si riduce infatti all'equazione:

$$\cos(K_k a) = \cos(ka) \quad (3.52)$$

che è equivalente a quella ottenuta nel limite alle alte energie. Lo spettro risulta essere quindi totalmente continuo.

Nel limite $P \rightarrow \infty$ invece il potenziale è talmente forte che il restringimento della barriera ha l'effetto di creare delle barriere di potenziale insormontabili, rendendo il problema analogo a quello di una serie di scatole di potenziale di larghezza a e con una parete in comune (Figura 12).

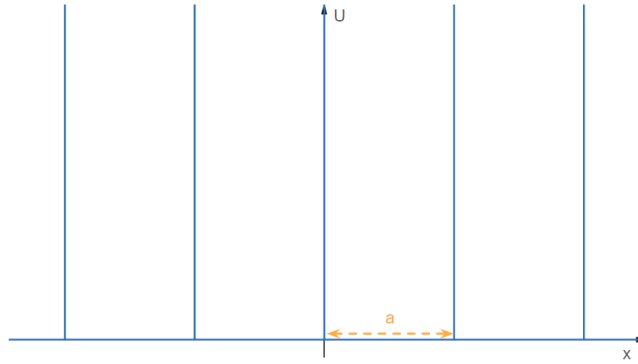


Figura 12: Sequenza infinita di scatole di potenziale di larghezza a con una parete in comune

Considerando che se $P \rightarrow \infty$ anche $\Omega \rightarrow \infty$, in quanto i due valori differiscono solo per un fattore costante, il problema in questo limite può essere analizzato andando a studiare il comportamento delle equazioni (3.36) nel limite $\Omega \rightarrow \infty$. Gli uno in somma e in differenza ai fattori $\frac{\Omega}{ik}$ risulteranno infatti trascurabili, ciò comporta una relazione tra i coefficienti A_n e B_n :

$$B_n = -A_n \quad (3.53)$$

che rende la soluzione dell'equazione di Schroedinger (3.31):

$$\Phi(x) = 2iA_n \sin(k(x - na)) \quad na < x < (n + 1)a \quad (3.54)$$

Imponendo la condizione a contorno $\Phi((n + 1)a) = 0$ data dal fatto che ora al posto delle funzioni delta di Dirac ci sono delle barriere di potenziale infinite si ottiene il vincolo su k :

$$k = \frac{\pi l}{a} \quad l \in \mathbb{Z} \quad (3.55)$$

La funzione d'onda si scrive quindi:

$$\Phi(x) = 2iA_n \sin\left(\frac{\pi l}{a}(x - na)\right) \quad na < x < (n + 1)a \quad (3.56)$$

Gli autovalori energetici, di conseguenza, sono quelli ottenuti studiando il problema di una scatola di potenziale:

$$w = \frac{\hbar^2 \pi^2 l^2}{2ma^2} \quad (3.57)$$

Un risultato analogo si ottiene osservando che nel limite $P \rightarrow \infty$ il lato destro dell'equazione (3.43) si riduce ad un insieme di rette verticali in corrispondenza degli zeri della funzione $\sin(ka)$, perciò gli unici valori ammessi saranno quelli corrispondenti ai valori $ka = n\pi$ con n intero e lo spettro sarà quindi totalmente discreto con gli autovalori energetici uguali a:

$$w = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.58)$$

Questi autovalori saranno infinitamente degeneri in quanto ogni scatola di potenziale presenterà il medesimo spettro. Nonostante però lo spettro energetico sia discreto e le scatole di potenziale siano in numero infinito, ma infinito numerabile, la degenerazione di ogni autovalore è un infinito continuo. Infatti è possibile costruire una soluzione dell'equazione di Schroedinger (2.3) nel seguente modo:

$$\Phi(x) = \begin{cases} 2iA_p \sin\left(\frac{\pi l}{a}(x - pa)\right) & pa < x < (p + 1)a \quad p \in B \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (3.59)$$

$$(3.60)$$

ove con B è indicato un sottoinsieme non vuoto degli interi. Degli esempi di autofunzioni costruite con il metodo indicato dall'equazione (3.60) sono mostrati in figura 13. Il numero di autofunzioni è quindi infinito, ma la sua potenza è quella dell'insieme di tutti i possibili sottoinsiemi di \mathbb{Z} escluso il sottoinsieme nullo, cioè di un infinito continuo.

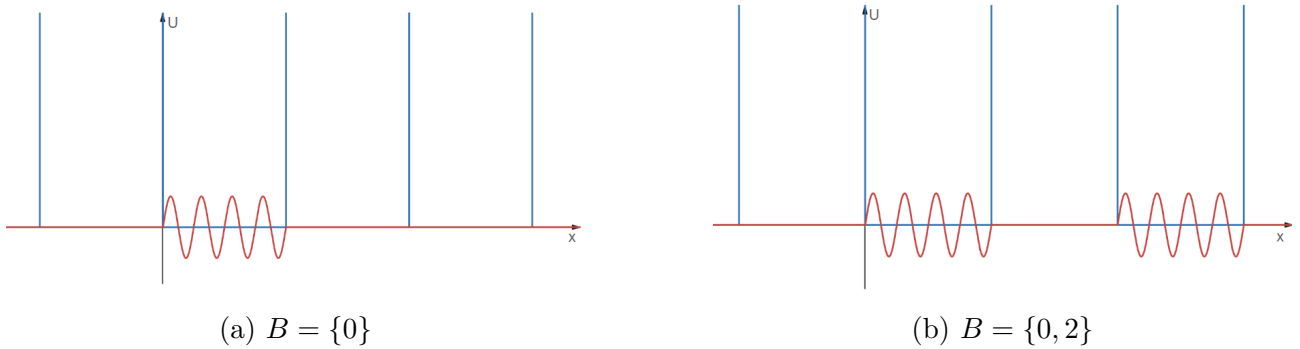


Figura 13: Esempi di funzione d'onda costruiti seguendo il metodo indicato dall'equazione (3.60) per diversi insiemi B . Entrambe sono soluzione dell'equazione di Schroedinger (2.3).

3.3.3 Densità degli stati

Dall'equazione (3.43) si ottiene un'espressione esplicita per K_k [9]:

$$K_k a = \arccos \left[\cos(ka) + P \frac{\sin(ka)}{ka} \right] \quad (3.61)$$

Considerando la corretta determinazione della funzione arcocoseno (Appendice B), il grafico di $K_k a$ in funzione di ka è mostrato in figura 14.

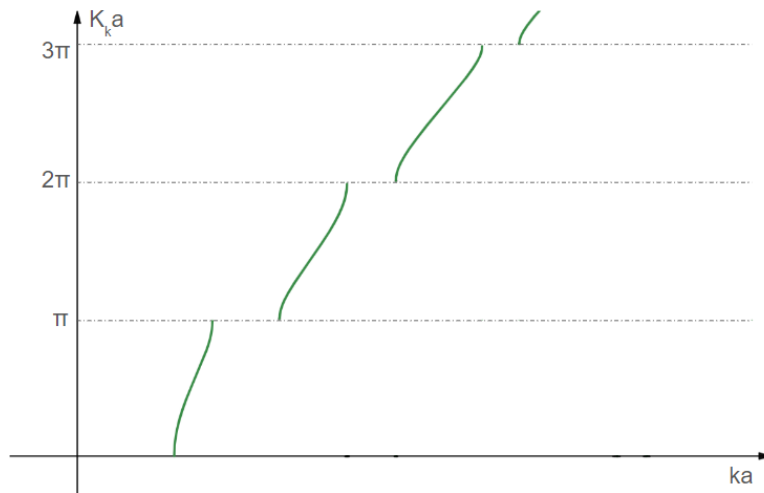


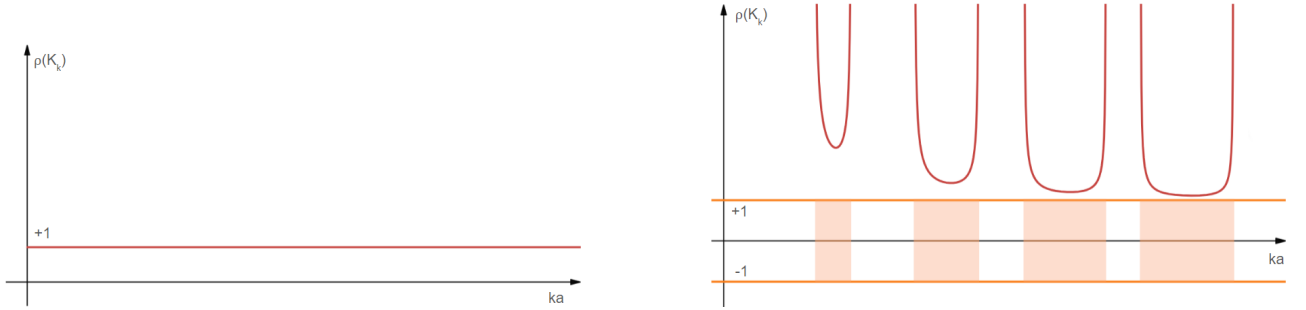
Figura 14: Grafico della funzione $K_k a$ in funzione di ka . Per realizzare il grafico è stato preso $P = \frac{3\pi}{2}$. Si può notare, come da ipotesi, che K_k sia una funzione monotona crescente, che i gap energetici si restringono quando ka aumenta e che siano posti in corrispondenza di $K_k a = n\pi$

Siccome le autofunzioni energetiche dipendono dal vettore d'onda di Bloch secondo l'equazione (2.27) possiamo stabilire una corrispondenza tra i valori di K_k e le autofunzioni. Considerando inoltre che k è una riparametrizzazione dell'energia (equazione (3.8a)) possiamo calcolare la derivata del vettore d'onda di Bloch K_k rispetto al vettore d'onda cinematico k . Per quanto detto in precedenza la derivata così ottenuta sarà proporzionale alla densità di autofunzioni, e

quindi di stati stazionari, rispetto al vettore d'onda cinematico. Tenendo conto della corretta determinazione dell'arcocoseno (Appendice B), si ha:

$$\rho(K_k) = \frac{dK_k}{dk} = \begin{cases} \frac{\sin(ka) - P \frac{\cos(ka)}{ka} + P \frac{\sin(ka)}{(ka)^2}}{\sqrt{1 - \left[\cos(ka) + P \frac{\sin(ka)}{ka} \right]^2}} & 2n\pi < ka < (2n+1)\pi & (3.62a) \\ -\frac{\sin(ka) - P \frac{\cos(ka)}{ka} + P \frac{\sin(ka)}{(ka)^2}}{\sqrt{1 - \left[\cos(ka) + P \frac{\sin(ka)}{ka} \right]^2}} & (2n+1)\pi < ka < (2n+2)\pi & (3.62b) \end{cases}$$

Per $P = 0$ il grafico delle densità è composto da una linea orizzontale, gli stati sono quindi equamente distribuiti (Figura 15a), per $P \neq 0$ si può notare invece come gli stati si addensino verso gli estremi delle bande ammesse (Figura 15b).



(a) $\rho(K_k)$ per $P = 0$, il grafico è composto da linee orizzontali, gli stati sono quindi distribuiti equamente e non sono presenti gap.

(b) $\rho(K_k)$ per $P = \frac{3\pi}{2}$. Si può vedere come gli stati si addensino verso le estremità delle bande energetiche (in arancione in figura).

Figura 15: Densità degli stati calcolata utilizzando l'equazione (3.62).

3.3.4 Un esempio

L'espressione degli autovalori energetici w in funzione del vettore d'onda di Bloch K_w di solito è molto complessa. Tuttavia in precedenza (Paragrafo 3.3.2) si è visto che nel limite $P \rightarrow \infty$ si ha un'espressione per il vettore d'onda cinematico k data da $ka = n\pi$, dalla quale, utilizzando le relazioni (3.8a), si ottiene un'espressione per gli autovalori energetici analoga a quella che si ottiene nel problema di una scatola di potenziale. Un altro modello in cui si può ottenere un'espressione di w in funzione di K_w è dato sempre dall'equazione (3.43), considerando $P \gg 1$ ed espandendo in serie di Taylor il lato destro dell'equazione attorno a uno zero della funzione $\sin(ka)$ [10]. Per fare ciò poniamo $ka = n\pi - \epsilon_k$ con $|\epsilon_k| \ll 1$ ed espandiamo in serie di Taylor al primo ordine in ϵ_k :

$$\cos(K_k a) \approx \cos(n\pi - \epsilon_k) + P \frac{\sin(n\pi - \epsilon_k)}{n\pi - \epsilon_k} \approx (-1)^n \left[1 - P \frac{\epsilon_k}{n\pi} \right] \quad (3.63)$$

Invertendo per ottenere un'espressione per ϵ_k ed utilizzando la relazione $ka = n\pi - \epsilon_k$ si arriva all'equazione:

$$ka = n\pi \left[1 - \frac{1}{P} (1 - (-1)^n \cos(K_k a)) \right] \quad (3.64)$$

Utilizzando ora la relazione (3.8a) ed esprimendo il vettore d'onda di Bloch in funzione dell'energia si ottiene:

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{2mw}}{\hbar} &= \frac{n\pi}{a} \left[1 - \frac{1}{P} (1 - (-1)^n \cos(K_w a)) \right] \\
\frac{2mw}{\hbar^2} &\approx \frac{n^2 \pi^2}{a^2} - \frac{2n^2 \pi^2}{a^2 P} (1 - (-1)^n \cos(K_w a)) \\
w &= \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \left[1 + \frac{2}{P} ((-1)^n \cos(K_w a) - 1) \right]
\end{aligned} \tag{3.65}$$

ove nel penultimo passaggio è stato trascurato il termine di ordine $1/P^2$ che nel limite $P \gg 1$ è trascurabile rispetto a $1/P$ a cui è proporzionale il doppio prodotto.

Si può vedere quindi come lo spettro ottenuto sia una correzione rispetto allo spettro di una particella in una scatola di potenziale unidimensionale di lato a , la correzione però rende lo spettro a bande in quanto K_w varia con continuità. Per semplicità e per ottenere un confronto più immediato con gli altri modelli è più conveniente studiare il risultato ottenuto mediante l'equazione (3.64). $K_k a$ per quanto visto nel capitolo 2.2 è in corrispondenza biunivoca con ka in modo che quando la banda è di numero pari $\cos(K_k a)$ sia decrescente e vada da 1 a -1 , mentre quando la banda è di numero dispari $\cos(K_k a)$ sia crescente e vada da -1 a 1. Inoltre la banda di numero 0 è quella corrispondente allo zero della funzione $\sin(ka)$ con $n = 1$ e così via. Ne consegue che, per la presenza del fattore $(-1)^n$, tutte le bande partano da un valore di $ka = n\pi \left[1 - \frac{2}{P} \right]$ e terminino ad un valore di $ka = n\pi$. Ciò implica che per le bande energetiche espresse tramite l'autovalore energetico w il limite superiore è sempre il valore dell'energia corrispondente al caso di una particella in una scatola di potenziale unidimensionale. Il modello in questa approssimazione restituisce bande di eguale larghezza, tuttavia anche per valori di P molto elevati deve rimanere valido il limite alle alte energie quando $ka \rightarrow \infty$, quindi i gap energetici che separano le bande devono progressivamente ridursi fino ad annullarsi completamente. Questo effetto non è visibile in questa approssimazione. Se ora si fa tendere P ad infinito le bande energetiche si addenseranno tutte sul valore terminale $ka = n\pi$, fino, nel limite, a collassare interamente su di esso. Come già osservato lo spettro sarà discreto con gli autovalori energetici ottenuti dall'equazione (3.58), lo spettro continuo a bande di cui è il limite però è doppiamente degenere e l'insieme delle autofunzioni appartenenti ad una singola banda è un infinito continuo, in quanto il numero di punti in un segmento è un infinito continuo. Ne consegue che tutte le autofunzioni appartenenti alla banda n -esima nel limite saranno associate all'autovalore n -esimo. Questo sarà quindi infinitamente degenere, ma di tipo continuo, si recupera così il risultato ottenuto nella sezione 3.3.2.

Appendice

A Discontinuità della derivata prima della funzione d'onda in presenza di potenziali deltiformi

La discontinuità della derivata in $x = na$ è valutabile come [11]:

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi(na+0)}{dx} - \frac{d\Phi(na-0)}{dx} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{d\Phi(na+\epsilon)}{dx} - \frac{d\Phi(na-\epsilon)}{dx} \right] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{na-\epsilon}^{na+\epsilon} \frac{d^2\Phi}{dx^2} dx \\ &= - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{na-\epsilon}^{na+\epsilon} \left(k^2 - 2\Omega \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x+na) \right) \Phi dx = 2\Omega\Phi(na) = \Omega [\Phi(na+0) + \Phi(na-0)] \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

ove è stata usata la continuità della funzione d'onda Φ .

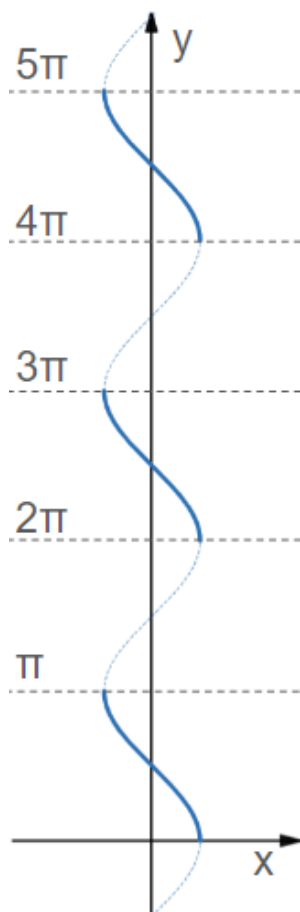
B Cambio di determinazione della funzione arcocoseno

La derivata canonica della funzione arcocoseno è:

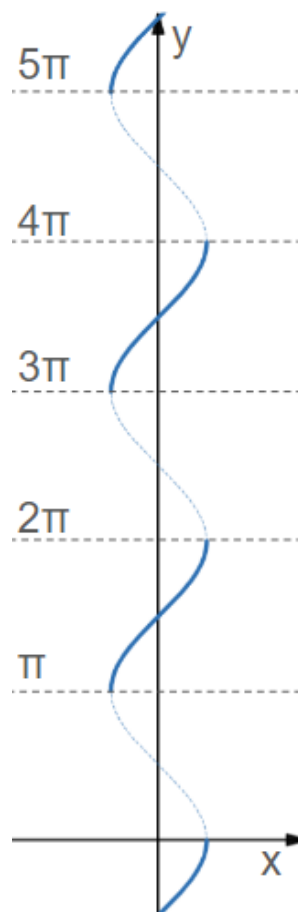
$$\frac{d}{dx} \arccos(x) = -\frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad (\text{B.1})$$

avendo invertito la funzione coseno nell'intervallo $[0, \pi]$.

Avendo associato univocamente ad ogni valore del vettore d'onda di Bloch K_k un valore del vettore d'onda cinematico k andando a coprire tutti i numeri reali positivi, per computare la funzione (3.61) bisogna invertire la funzione coseno su intervalli diversi da $[0, \pi]$. Per fare ciò si considera la funzione $x = \cos(y)$, si nota che per $y \in [2n\pi, (2n+1)\pi]$ con n intero si ha la funzione arcocoseno invertita sull'intervallo canonico $[0, \pi]$ e le sue traslazioni di 2π sull'asse delle ordinate (Figura 16a). Per $y \in [(2n+1)\pi, (2n+2)\pi]$ invece si ha la funzione arcocoseno invertita sull'intervallo canonico e traslata di π , ma riflessa rispetto all'asse y , insieme alle sue traslazioni di 2π su questo asse (Figura 16b). Quando si calcola la derivata quindi, pur essendo uguale in modulo, questa prenderà quindi un segno meno se valutata sull'intervallo $[2n\pi, (2n+1)\pi]$, in quanto in questi intervalli la funzione $x = \cos(y)$ è decrescente, mentre sarà positiva se valutata sull'intervallo $[(2n+1)\pi, 2n\pi]$ poichè su questi intervalli la funzione $x = \cos(y)$ è crescente. La derivata ignora le traslazioni, mentre per il grafico di K_k bisogna tenerne conto, per questo le diverse sezioni di cui è composto il grafico iniziano alla stessa ordinata di quando finisce la sezione precedente.



(a) Funzione $x = \cos y$. I tratti evidenziati sono quelli compresi tra $2n\pi$ e $(2n + 1)\pi$. Si può riconoscere nell'intervallo $[0, \pi]$ la funzione arcocoseno nella determinazione classica, mentre negli intervalli successivi si trovano le sue traslazioni di π



(b) Funzione $x = \cos y$. I tratti evidenziati sono quelli compresi tra $(2n + 1)\pi$ e $(2n + 2)\pi$. Si può riconoscere nell'intervallo $[\pi, 2\pi]$ la funzione arcocoseno nella determinazione classica riflessa rispetto all'asse y , mentre negli intervalli successivi si trovano le sue traslazioni di π

Figura 16: Grafici della funzione $x = \cos y$. In figura 16a è evidenziata la funzione negli intervalli $[2n\pi, (2n+1)\pi]$, in figura 16b è invece evidenziata la funzione negli intervalli $[(2n+1)\pi, (2n+2)\pi]$

Bibliografia

- [1] Roberto Zucchini. *Quantum Mechanics: Lecture Notes*. Cap. 4.9.
- [2] Roberto Zucchini. *Quantum Mechanics: Lecture Notes*. Cap. 8.4.
- [3] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. 8th ed. John Wiley & Sons, Inc, 2005. ISBN: 0-471-41526-X.
- [4] Ausis. CC BY 3.0 <https://creativecommons.org/licenses/by/3.0>, da Wikimedia Commons, nessuna modifica apportata. URL: <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/d/de/Nacl-structure.jpg>.
- [5] Benjah-bmm27 Aiyizo. Dominio pubblico, da Wikimedia Commons. URL: <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/e/e9/Sodium-chloride-3D-ionic.png>.
- [6] W.G.Penney R. de L. Kroenig. «Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices». In: *Proceedings of the Royal society of London* 130 (1931), pp. 499–501.
- [7] Roberto Zucchini. *Quantum Mechanics: Lecture Notes*. Cap. 4.10.
- [8] W.G.Penney R. de L. Kroenig. «Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices». In: *Proceedings of the Royal society of London* 130 (1931), pp. 501–503.
- [9] W.G.Penney R. de L. Kroenig. «Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices». In: *Proceedings of the Royal society of London* 130 (1931), pp. 504–505.
- [10] D. L. Maslov. *Dirac-Kronig-Penney model*. 2012. URL: https://www.phys.ufl.edu/~maslov/phz6426/phz6426_dkp.pdf.
- [11] Roberto Zucchini. *Quantum Mechanics: Lecture Notes*. Cap. 4.6, p. 444.