Teorema di Bloch

Introduzione

(vedi anche Ascroft, dove c'è un approccio alternativo)

Cominciamo col considerare un solido unidimensionale.

Il modello è quello di una particella (l'elettrone) in un *potenziale periodico*.
L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo (equazione secolare) che descrive questo sistema è :

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi = 0$$

dove il potenziale è periodico di periodo a :

$$V(x) = V(x+a).$$

E' possibile dimostrare (teorema di Floquet) che le funzioni d'onda soluzioni di una tale equazione di Schrödinger (autofunzioni dell'energia), sono tali da rimanere uguali a meno di un fattore moltiplicativo Q (*fattore di Floquet*) per 'spostamento di un periodo':

$$\psi(x+a) = Q\,\psi(x).$$

La dimostrazione è basata sul fatto che l'equazione di Schrödinger, a causa del potenziale periodico, è invariante per 'traslazione di un periodo'.

Sommariamente diciamo che se facciamo la trasformazione $x \to x+a$ nell'Hamiltoniana il potenziale (periodico) non cambia, così come l'opertore laplaciano (operatore differenziale) (resta da capire da dove esce il fattore di Floquet).

Il teorema diBloch che stiamo per studiare parte da questo assunto, e si occupa di classificare le soluzioni di una equazione di Schrödinger con potenziale periodico andando a cercare i valori possibili che assume il fattore moltiplicativo Q (fattore di Floquet).

Come anticipazione osserviamo che in particolare una funzione del tipo

$$\psi(x) = e^{\pm ikx}\,u_k(x)$$

dove $u_k(x)$ è una funzione periodica di periodo a (cioè $u_k(x) = u_k(x+a)$), è del tipo richiesto.
Infatti si ha:

$$\psi(x+a) = e^{\pm ik(x+a)}\,u_k(x+a) = e^{\pm ika}\,e^{\pm ikx}\,u_k(x) = e^{\pm ika}\,\psi(x).$$

In questa forma particolare dunque il fattore di Floquet è dunque costituito da una fase, cioè

$$Q = e^{\pm i\, k\, a}.$$

Questo è compatibile col fatto che spostandosi di a la fisica del sistema non cambia (potenziale periodico), infatti il fattore di fase non cambia la descrizione fisica data dalla funzione d'onda.

Il k che compare è un parametro al variare del quale il fattore di Floquet assume un ventaglio di valori possibili.

- Teorema di Bloch -

enunciato
Stabilito (teorema di Floquet) che le funzioni d'onda soluzioni dell'equazione di Schrödinger di un sistema con potenziale periodico, sono tali da rimanere uguali a meno di un fattore moltiplicativo denominato '*fattore di Floquet*' Q per 'spostamento di un periodo' :

$$\psi(x+a) = Q\,\psi(x)$$

vogliamo dimostrare che, in particolare, si possono scrivere nella forma :

$$\psi(x) = e^{\pm i k x}\, u_k(x) = b(x;k) \qquad \text{(funzioni di Bloch)}$$

dove $u_k(x)$ è una funzione periodica di periodo a (cioè $u_k(x) = u_k(x+a)$.
In altre parole vogliamo dimostrare che il fattore di Floquet Q può assumere solo i valori

$$Q = e^{\pm i\, k\, a}.$$

commenti :

a) Il teorema di Floquet è un teorema matematico del tutto generale, che riguarda le equazioni differenziali con coefficienti non costanti periodici (come è l'equazione di Schrödinger nel caso di potenziale periodico); esso introduce solo il fattore di Floquet. Bloch ne ha dato un'interpretazione fisica, scrivendo il fattore di Floquet come un esponenziale, e quindi introducendo un vettore d'onda k (a tre dimensioni infatti k è un vettore). tale interpretazione fisica si presta, oltre che al modello quantistico dei solidi, ad altre situazioni fisiche, in cui ci siano onde in un mezzo periodico.
(?) da verificare!

b) L'equazione di Schrödinger è un'equazione differenziale, e dunque se non si specificano le condizioni iniziali ha una famiglia di infinite soluzioni.
Tuttavia si tratta di un'equazione differenziale lineare (del second'ordine), e dunque le infinite soluzioni differiscono solo per (due) costanti.
Inoltre il teorema di esistenza e unicità dice che una volta specificate le condizioni iniziali, la soluzione è unica.
Queste due cose insieme comportano che se una certa funzione è soluzione dell'equazione, anche se non ho specificato le condizioni al contorno, e dunque ho infinite soluzioni, la forma delle soluzioni deve essere quella, e possono variare solo le 'costanti'.
Nella dimostrazione ad un certo punto si dice "supponiamo che la soluzione abbia la forma...".
Questo può confondere, perché sembra un'ipotesi aggiuntiva. In realtà per quanto detto, se la introduciamo come ipotesi aggiuntiva, ma poi dimostriamo che una tale forma soddisfa l'equazione, sappiamo per il teorema di esistenza e unicità che la forma delle soluzioni è quella.

** dimostrazione del teorema di Bloch **

Consideriamo una coppia di soluzioni indipendeti dell'equazione di Schrödinger :

$$f(x) \quad \text{e} \quad g(x)$$

Essendo l'equazione di Schrödinger un'equazione differenziale del second'ordine, esistono sicuramente due soluzioni linearmente indipendenti, e tutte le altre soluzioni sono combinazione lineare di queste.

Poiché, come detto prima, l'equazione di Schrödinger va in se se 'mi sposto di un periodo', anche $f(x+a)$ e $g(x+a)$ devono essere ancora soluzione di tale equazione.
Per convincersene basta sistituire $x \to x+a$ nell'Hamiltoniana e notare che il potenziale (periodico) non cambia, e l'operatore laplaciano nemmeno (operatore differenziale), tranne che per un fattore moltiplicativo.

Essendo l'equazione un'equazione differenziale del second'ordine, ha solo due soluzioni linearmente indipendenti, e quindi queste altre due soluzioni si devono poter scrivere come combianzione lineare di f e g:

$$f(x+a) = \alpha_1 \, f(x) + \alpha_2 \, g(x)$$

$$g(x+a) = \beta_1 \, f(x) + \beta_2 \, g(x).$$

α_1, α_2, β_1 e β_2 sono dei parametri che dipendono dall'energia E (e dalle condizioni iniziali) : assegnato un valore dell'energia sono delle costanti (da determinare con le condizioni iniziali).
(per convincersene basta pensare che l'equazione in questione è un' equazione differenziale lineare con un parametro)

Avendo già assodato (teorema di Floquet) che le soluzioni dell'equazione di Schrödinger in questione godano della seguente proprietà

$$\psi(x+a) = Q \, \psi(x)$$

vogliamo trovare i valori possibili del fattore di Floquet Q.

- Valori possibili del fattore di Floquet
La soluzione dell'equazione si deve poter scrivere come combinazione lineare delle due soluzioni linearmente indipendenti $f(x)$ e $g(x)$:

$$\psi(x) = A \, f(x) + B \, g(x).$$

Consideriamo ora la funzione $\psi(x+a)$:

$$\psi(x+a) = A \, f(x+a) + B \, g(x+a) = A \, [\alpha_1 \, f(x) + \alpha_2 \, g(x)] + B \, [\beta_1 \, f(x) + \beta_2 \, g(x)]$$

$$= [A \, \alpha_1 + B \, \beta_1] \, f(x) + [A \, \alpha_2 + B \, \beta_2] \, g(x).$$

Sostituendo queste due espressioni nella formula

$$\psi(x+a) = Q \, \psi(x)$$

si ha :

$$[A \, \alpha_1 + B \, \beta_1] \, f(x) + [A \, \alpha_2 + B \, \beta_2] \, g(x) = Q \, [A \, f(x) + B \, g(x)]$$

$$= Q\,A\,f(x) + Q\,B\,g(x).$$

Allora possiamo eguagliare i coefficienti di queste due combinazioni lineari di $f(x)$ e $g(x)$, ottenendo un sistema di due equazioni :

$$\begin{cases} A\,\alpha_1 + B\,\beta_1 = Q\,A \\ A\,\alpha_2 + B\,\beta_2 = Q\,B \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\,(\alpha_1 - Q) + B\,\beta_1 = 0 \\ A\,\alpha_2 + B\,(\beta_2 - Q) = 0 \end{cases}$$

Cerchiamo di capire cosa sono le varie quantità che compaiono in questo sistema.
Le incognite di questo sistema sono le costanti A e B, cioè questo sistema ci dice quanto devono valere queste costanti affinché sia $\psi(x+a) = Q\ \psi(x)$. Inoltre, dovremo imporre delle condizioni sui coefficenti α_1, α_2, β_1, β_2 e Q affinché questo sistema (lineare omogeneo) non abbia solo la soluzione banale per le incognite A e B.

Dobbiamo dunque imporre che il determinante della matrice dei coefficienti sia nullo :

$$\begin{vmatrix} \alpha_1 - Q & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 - Q \end{vmatrix} = 0$$

$$Q^2 - (\alpha_1 + \beta_2)\,Q + \alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1 = 0$$

Questo quindi è un modo per assegnare un'equazione a cui deve soddisfare il fattore di Floquet Q.

(≈A210)
Torniamo ora all'equazione differenziale e utilizzaimo il *Teorema del wronskiano* :

> "data un'equazione differenziale lineare, il wronskiano è indipendente dal punto"
>
> dim.:
>
> Scriviamo l'equazione differenziale per entrambe le soluzioni linearmente indipendenti $f(x)$ e $g(x)$. Poi […]

Da questo teorema segue che

$$\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1 = \begin{vmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{vmatrix} = 1$$

infatti […]

In definitiva, l'equazione cui deve soddisfare Q assume la forma più semplice

$$Q^2 - (\alpha_1 + \beta_2)\, Q + 1 = 0.$$

Questa equazione di secondo grado ha due soluzioni, chiamiamole Q_1 e Q_2 :

[…]

Dunque la particolarità di queste due soluzioni, è che, per qualunque scelta dei parametri α_1 e β_2 (cioè per ogni scelta dell'energia) si ha $Q_1 Q_2 = 1$.

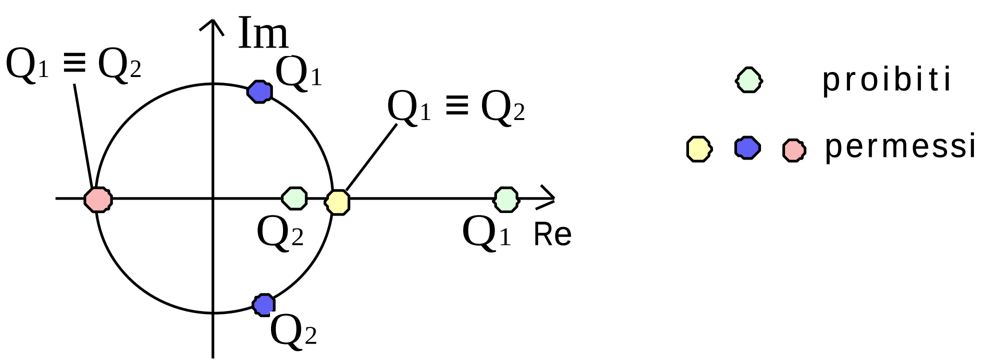
Quindi è questo il 'vincolo' su Q_1 e Q_2, cioè su Q, a cui giungiamo supponendo che $\psi(x+a) = Q\,\psi(x)$.

Nell'ambito di questo vincolo esaminiamo quali sono le possibilità.

- Q reale :
  - $Q_1 = 1$; $Q_2 = 1$ => $Q_1 Q_2 = 1$
  - $Q_1 = -1$; $Q_2 = -1$ => $Q_1 Q_2 = 1$
  - $Q_1 < 1$; $Q_2 > 1$ tali che $Q_1 Q_2 = 1$
  - $Q_1 > 1$; $Q_2 < 1$ tali che $Q_1 Q_2 = 1$
- Q complesso :
  - Q_1 e Q_2 complessi coniugati di modulo 1 => $Q_1 Q_2 = 1$

Vediamo però che gli ultimi due casi di Q reale vanno scartati, poiché implicherebbero una funzione d'onda non più sommabile. Infatti, se $Q > 1$, ciò implica che man mano che ci si sposta di periodo in periodo con il valore di x, il valore di ψ viene moltiplicato sempre per un numero > 1 e quindi 'esplode' all'∞. Ciò vuol dire che non è a quadrato sommabile, e quindi non ha significato fisico.

Rappresentiamo sul piano complesso i valori permessi e quelli proibiti di Q :



Ricapitolando, ad ogni valore dell'energia corrispondon due certe autofunzioni, caratterizzate da certi valori dei parametri α_1, α_2 e β_1, β_2.
Infatti l'equazione di Schrödinger è del second'orine, e dunque per ogni valore di E ci sono due soluzioni linearmente inipendenti, combinazioni lineari di due certe soluzioni indipendenti scelte come base. Detto in altri termini l'energia è due volte degenere.
Questi valori di α_1, α_2 e β_1, β_2 a loro volta determinano una coppia di valori del fattore di Floquet.
Abbiamo poi visto che solo le energie a cui corrispondono valori del fattore di Floquet sul cerchio unitario del piano complesso sono fisicamente accettabili.
In questi casi, le funzioni d'onda del sistema possono essere rappresentate nella forma

$$b(x\,;\,k) = e^{i\,k\,x}\,u(x\,;\,k)$$

con $u(x\,;\,k)$ funzione periodica in x, di periodo a, e vengono chamate **funzioni di Bloch**. Tale forma garantisce la proprietà di periodicità, infatti :

$$\psi(x+a) = Q\,\psi(x)$$

$$b(x+a\,;\,k) = e^{i\,k\,(x+a)}\,u(x+a\,;\,k) = e^{i\,k\,a}\,e^{i\,k\,x}\,u(x\,;\,k) = e^{i\,k\,a}\,b(x\,;\,k) = Q\,b(x\,;\,k).$$

** fine dimostrazione del teorema di Bloch **

(B359)
- **Relazione di dispersione** (dipendenza di E da k) -
Vogliamo ora indagare su come sono legati un certo autovalore dell'energia E e il fattore di Floquet $Q = e^{\pm\,i\,k\,a}$ della corrispondente autofunzione.
In altre parole cerchiamo una funzione che leghi l'energia E e il valore di k.
Anticipiamo che dimostreremo che la dipendenza dell'energia E da k è (quasi) lineare.

Descrizione qualitativa

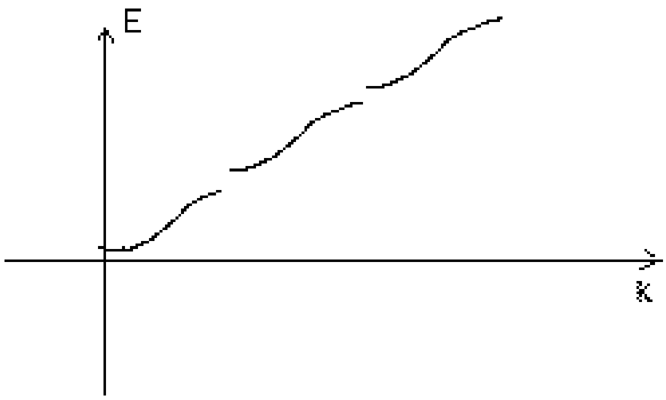
Vogliamo studiare la funzione che esprime la dipendenza dell'energia del sistema da k. In particolare vedremo che questa funzione è monotòna, cioè al crescere di k (in modulo) l'energia cresce sempre, nel dominio in cui è definita questa funzione.

Dobbiamo considerare attentamente il <u>dominio di definizione</u>.

Infatti abbiamo visto che il fattore di Floquet può assumere dei valori reali diversi da ± 1 che, sebbene permessi 'dalla matematica', portano a delle funzioni d'onda inaccettabili per motivi fisici.

Per questo motivo ci aspettiamo che i valori $\pm\,2\,n\,\pi/a$ di k siano dei punti di discontinuità per la funzione $E(k)$.

Il grafico di questa funzione è del tipo :



“Ripiegando” tutto nella prima zona di Brillouin, e cioè quella attorno all’origine e compresa tra i primi punti di discontinuità, si ha un grafico del tipo

* mettere qui il grafico *

[…]da completare, vedi quaderno (e senti cassette)[…]

Passiamo ad uno studio più dettagliato.

Lemma (sugli zeri delle funzioni di Bloch)

La funzione d’onda del sistema (funzione di Bloch)

$$b(x;k) = e^{i\,k\,x}\,u_k(x)$$

non ha zeri sull’asse reale

-dim.: (per assurdo)

supponiamo che esista un x_0 reale e tale che $b(x_0;k) = 0$. Andiamo allora a considerare la derivata prima di b in quel punto, scrivendola come un certo modulo ed una certa fase :

$$b'(x_0;k) = \delta\, e^{i\,\gamma}.$$

D’altra parte le funzioni di Bloch sono soluzioni di un’equazione differenziale, e quindi sono note a meno di una costante moltiplicativa.
Possiamo cioè moltiplicare l’intera funzione per la costante $e^{-i\,\gamma}$ “senza cambiare la fisica”.
((?)non sono sicuro che sia questo il motivo per cui si può moltiplicare per una costante)
(può darsi che più semplicemente qui sta moltiplicando per una fase che non cambia lo stato descritto dalla funzione d’onda. Dunque tutto questo giro di parole per dire che posso scegliere la fase in modo che la derivata prima sia reale)

Insomma possiamo rendere reale la derivata prima della funzione di Bloch:

$$b'(x_0;k) = \delta\, e^{i\gamma} e^{-i\gamma} = \delta.$$

Ne consegue che la funzione $b(x;k)$ è reale, infatti possiamo assumere le due relazioni

$$b(x_0;k) = 0 \qquad \text{e} \qquad b'(x_0;k) = \delta$$

come condizioni iniziali dell'equazione di Schrödinger. L'equazione è a coefficenti reali, le condizioni iniziali sono reali, e quindi le funzioni di Bloch devono essere reali.
Ma questo è un assurdo, perché le funzioni di Bloch sono sicuramente funzioni complesse. Infatti hanno il fattore di Floquet, che come abbiamo visto ha tra i valori possibili dei valori complessi.
Poiché l'assurdo partiva dal fatto che la funzione di Bloch abbia una soluzione sull'asse reale, la conclusione è che le funzioni di Bloch non si annullano mai sull'asse reale.

commento : dire che la b non ha zeri sull'asse reale in effetti significa dire che non si annulla mai. Infatti, sebbene vista come funzione matematica avrebbe senso pensare a degli zeri complessi, se la consideriamo come funzione d'onda di un sistema, la variabile x può essere solo reale.

-fine dim.

Proposizione (sulla dipendenza di E da k)

Vogiamo ora dimostrare la monotonìa della dipendenza di E da k.
(Vedremo che tale monotonia può venir meno solo quando k è tale che Q sta nei punti ± 1 sulla circonferenza complessa).

- dimostrazione

Consideriamo due valori molto prossimi di k, ossia k e $k+\varepsilon$.
Entrambe le corrispondenti funzioni di Bloch soddisfano l'equazione di Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 b(x;k)}{dx^2} + V(x)\right] b(x;k) = E(k)\, b(x;k)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 b(x;k+\varepsilon)}{dx^2} + V(x)\right] b(x;k+\varepsilon) = E(k)\, b(x;k+\varepsilon)$$

Consideriamo ora la funzione

$$\frac{b^2(x;k)}{b(x;k+\varepsilon)}$$

essa 'si comporta bene' (non diverge) perché abbiamo dimostrato che in denominatore b non si annulla mai sull'asse reale.

Vediamo che il fattore di Bloch di questa funzione è

$$e^{i(k-\varepsilon)x}.$$

Infatti il fattore di Bloch del numeratore è

$$e^{2ikx}$$

mentre quello al denominatore è

$$e^{-i(k+\varepsilon)x}$$

e dunque complessivamente si ha

$$e^{2ikx}\,e^{-i(k+\varepsilon)x} = e^{i(2k-k-\varepsilon)x} = e^{i(k-\varepsilon)x}.$$

Dunque se la funzione $b(x;k+\varepsilon)$ ha numero d'onda $k+\varepsilon$, la funzione $b^2(x;k)/b(x;k+\varepsilon)$ ha numero d'onda $k-\varepsilon$.

Inoltre si può provare che $b^2(x;k)/b(x;k+\varepsilon)$ è un'autofunzione dell'energia il cui autovalore è

$$2E(k) - E(k+\varepsilon).$$

Per ε che tende a zero, possiamo approssimare quest'espressione sviluppando in serie il secondo termine rispetto ad ε intorno allo zero :

$$2E(k) - E(k+\varepsilon) \approx 2\,E(k) - E(k) - \varepsilon\, dE/dk = E(k) - \varepsilon\, dE/dk$$

e questo è vero a meno di termini quadratici rispetto a $E(k+\varepsilon) - E(k)$ che da quanto appena visto, è a sua volta dell'ordine di $\varepsilon\, dE/dk$, e che quindi si possono scartare.

Prima di dimostrare che effettivamente l'autovalore dell'autofunzione di Bloch $b^2(x;k)/b(x;k+\varepsilon)$, il cui 'numero d'onda' (fase del fattore di Bloch) abbiamo visto essere $k-\varepsilon$, ha come autovalore $2E(k) - E(k+\varepsilon) \approx E(k) - \varepsilon\, dE/dk$, notiamo che questo significa che diminuendo k della quantità ε, l'energia diminuisce di una quantità $\varepsilon\, dE/dk$, e se la derivata è positiva, questo comporta che se k decresce, decresce anche l'energia. Se la derivata è negativa la dipendenza è inversa, ma sempre monotona. Inoltre, notiamo che la dipendenza è quasi lineare.

Dimostriamo dunque che la funzione di Bloch $b^2(x;k)/b(x;k+\varepsilon)$, è autofunzione dell'energia di autovalore $2E(k) - E(k+\varepsilon)$.
La dimostrazione si fa in maniera diretta, scrivendo l'equazione di Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{d^2\,b(x;k+\varepsilon)}{dx^2} + V(x)\right]\frac{b^2(x;k)}{b(x;k+\varepsilon)} = \left[2\,E(k) - E(k+\varepsilon)\right]\frac{b^2(x;k)}{b(x;k+\varepsilon)}$$

*(Saturday 18/Dec/1999, 0:45 (notare l'orario!) prima di abbandonare questo conto, noto che qui c'è una cosa

interessante da approfondire :
Il metodo per separazione di variabili dice che l'autofunzione 'totale' è il prodotto delle 'autofunzioni a una dimensione', e che il corrispondente autovalore è la somma di quelli a una dimensione.
Ebbene, ricordando che io so che l'autovalore di b è E, da questo si può passare a dire che l'autovalore di b^2 è $2E$, e poi dal fatto che l'autovalore di $b(x;k+\varepsilon)$ è $E(k+\varepsilon)$ si passa al fatto che l'autovalore di $1/b(x;k+\varepsilon)$ è $-E(k+\varepsilon)$ (?), e mettendo insieme il tutto si ottiene la funzione qui sopra!*
[…]
Vogliamo dimostrare che la funzione $\dfrac{b^2(x;k)}{b(x;k+\varepsilon)}$ è autofunzione dell'Hamiltoniano, con autovalore $2E(k) - E(k+\varepsilon)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\frac{b^2(x;k)}{b(x;k+\varepsilon)} = \left[2E(k)-E(k+\varepsilon)\right]\frac{b^2(x;k)}{b(x;k+\varepsilon)}.$$

Infatti, facendo la derivata della funzione b^2/b si ha :

[…]

quindi non si inverte mai il 'moto' sul cerchio di Floquet

[…]

i punti $+1$ e -1 sono quelli in cui la dipendenza tra k e l'energia cambia in modo drammatico (estremi di banda)
in qualsiasi altro punto del cerchio la dipendenza è (quasi) lineare
[…]

- fine dimostrazione

Considerazioni sulla relazione di dispersione (struttura a bande)

• zona di Brillouin

E' l'intervallo dei valori di k di ampiezza pari al 'periodo del fattore di Floquet' (infatti l'esponenziale $e^{i\,k\,a}$ è una funzione periodica rispetto a k, di periodo $2\pi/a$).
La prima zona di Brillouin è quella centrata nell'origine, e poi a seguire le altre.
(controllare)

• struttura a bande dello spettro

Se abbiamo a che fare con un sistema con potenziale periodico, abbiamo dimostrato che le funzioni d'onda sono funzioni di Bloch, cioè del tipo

$$\psi(x) = e^{i\,k\,x}\,u(x;k).$$

In particolare avranno questa forma le autofunzioni dell'energia.

Abbiamo appena dimostrato (inserendo un'autofunzione con questa forma nell'equazione di Schrödinger) che l'autovalore dell'energia corrispondente a questa autofunzione dipende da k (in maniera quasi lineare).

Più in generale le (auto)funzioni di un sistema con potenziale periodico hanno la forma

$$Q\,\phi(x).$$

Ora da una parte sappiamo che alcune autofunzioni, con certi valori di Q debbono essere scartate per motivi fisici, insieme con le corrispondenti energie.

D'altra parte, avendo dimostrato che la dipendenza tra E e k è monotòna, concludiamo che il fattore di Floquet Q si comporta nel modo seguente al variare dell'energia :

partiamo da $Q_1=Q_2=1$;

all'aumentare dell'energia abbiamo i valori sulla circonferenza complessa di raggio unitario, che sono tutti valori fisicamente permessi, e che corrispondono quindi a valori permessi dell'energia e a due fattori di Floquet in forma esponenziale, corrispondenti a due valori opposti di k, compresi tra 0 e $\pm\pi/a$;

arrivati a $k=\pm\pi/a$, e quindi a $Q_1=Q_2=-1$, continuando a salire in energia Q assume dei valori reali fisicamente proibiti, e quindi saranno proibite le corrispondenti energie
(per quanto riguarda la funzione $E(k)$, per questi valori di k avrà dunque delle discontinuità);

continuando a salire in energia, il fattore di Floquet potrebbe tornare sulla circonferenza unitaria, dando luogo ad altre energie permesse, ma immancabilmente, essendo la $E(k)$ monotòna, continuando a salire in energia, si arriva ad energie proibite, per $k=\pm\pi/a$.

Quello che abbiamo descritto è dunque uno spettro di energia fatto da intervalli continui di energie permesse e intervalli continui di energie proibite.
Questi intervalli si denominano bande, e si parla di strurrura a bande dello spettro di energia.

A causa di questa struttura a bande, una certa energia può essere individuata specificando il valore di k compreso nel suo intervallo $[-\pi/a\ ,\ \pi/a]$ (prima ziona di Brillouin), e da un numero intero che identifica la banda di energia 'permessa' a cui appartiene l'energia in questione. Chiamiamo questo '*indice di banda* ' con q.
Allora le autofunzioni dell'Hamiltoniana del sistema sono delle funzioni di Bloch distinte da un indice di banda q, e le energie corrispondenti sono delle funzioni di k anc'esse distinte dall'indice q :

$$\psi = b_q(x;k) = e^{i\,k_q x}\,u_q(x)$$ (la seconda forma l'ho aggiunta io : controllare)

$$E = w_q(k).$$

Proprietà delle funzioni di Bloch

Proprietà di periodicità :

$$b_q(x+a\,;\,k) = e^{i\,k\,a}\,b_q(x\,;\,k)$$

$$b_q\left(x\,;k+\frac{2\pi}{a}\right) = b_q(x\,;k)$$

$$w_q\left(k+\frac{2\pi}{a}\right) = w_q(k).$$

Proprietà di simmetria :

$$b_q(x\,;-k) = b^*_q(x\,;k)$$

$$w_q(-k) = w_q(k)$$

(quest'ultima proprietà è legata all'invarianza per time reversal dell'equazione di Schrödinger).