



# **Physik der Kondensierten Materie 1**

**Rudolf Gross  
WS 2020/2021  
Teil 19**

**Vorlesungsstunde: 19.01.2021**

## niederdimensionale Elektronengassysteme

räumliche Einschränkung von 3D-Elektronengas durch Potenzialbarrieren

→ 2D-, 1D- und 0D-Elektronengas

### 2D - Elektronengas

$$E_{n_z} = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m} + \epsilon_{n_z} = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2} n_z^2$$

2D-Subbänder, treppenförmige DOS

### 1D – Elektronengas: Quantendraht

$$E_{n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \epsilon_{n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2} n_z^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_y^2} n_y^2$$

1D-Subbänder,  $1/\sqrt{E}$  förmige DOS mit Singularitäten bei  $E = \epsilon_{n_y, n_z}$

### 0D – Elektronengas: Quantenpunkt

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \epsilon_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2} n_z^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_y^2} n_y^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_x^2} n_x^2$$

diskrete Energiewerte → künstliche Atome

## Leitwertquantisierung in eindimensionalen Leitern (ballistischer Transport)

$$I_q = J_q A = -en \langle v \rangle A$$

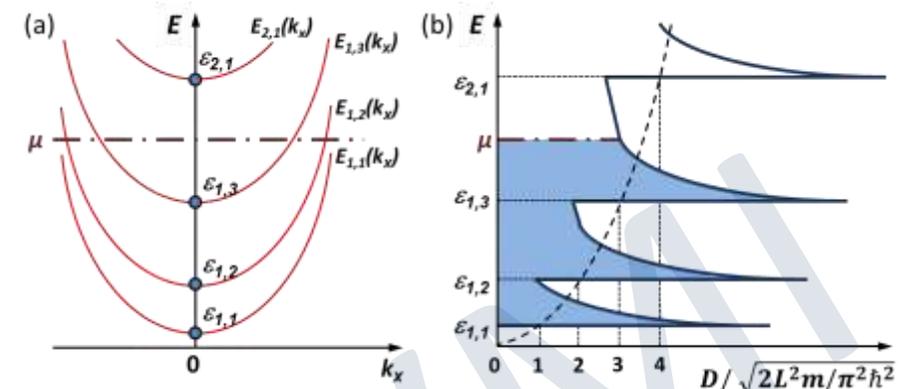
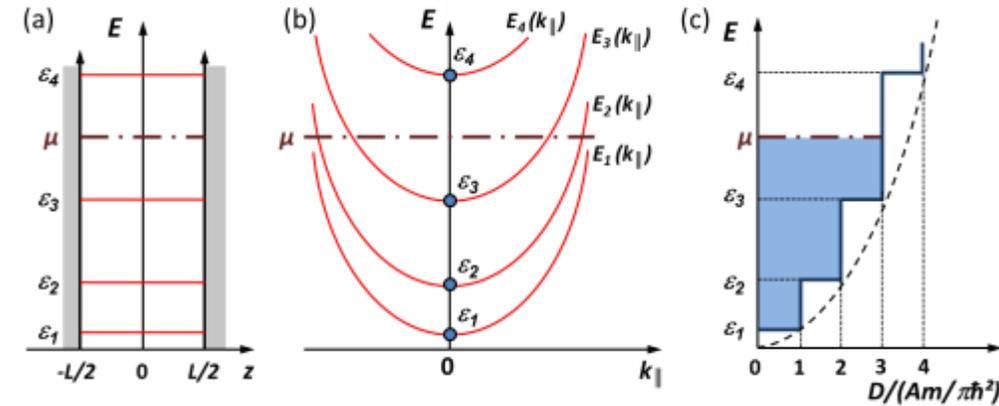
$$= -e \frac{N}{V} A \frac{1}{N} \sum_{k, \sigma} \frac{\hbar(k^l - k^r)}{m} = -\frac{2e}{L} \sum_k \frac{\hbar(k^l - k^r)}{m}$$

→ 1D-Kanal besitzt Leitwert  $G = 2 \frac{e^2}{h} = 2G_Q$

$$\Rightarrow I_q = 2 \frac{e^2}{h} U \Rightarrow G = 2G_Q = 2 \frac{e^2}{h}, \quad R = \frac{1}{2} R_Q = \frac{1}{2} \frac{h}{e^2}$$

$$R_Q = \frac{h}{e^2} = 25\,812.807\,572(95) \, \Omega$$

Klitzing-Konstante



- **Mängel des freien Elektronengasmodells**

nicht erklärt werden kann: Unterschied zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren, Anzahl der Valenzelektronen, positive Werte für die Hall-Konstante oder Thermokraft,  $T$ - und  $B$ -Abhängigkeit der Hall-Konstante erklären, ....

- **Berücksichtigung des periodischen Kristallpotenzials  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$**

→ keine völlig freien Elektronen mehr: Bewegung in periodischem Gitterpotenzial

→ nach wie vor gehen wir von **völlig unabhängigen Elektronen** aus (keine e-e-Wechselwirkung)

- **Bloch-Elektronen:** löse Schrödinger-Gleichung für ein Elektron in gitterperiodischem Potenzial  $V(\mathbf{r})$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{G} = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3$$

Ansatz: Superposition ebener Wellen:  $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  → Übergang zum reziproken Raum (Fourier-Entwicklung)

$$\left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0 \quad \text{Schrödinger-Gleichung im reziproken Raum}$$

→  **$N$  unabhängige Gleichungssysteme:** eines pro  $\mathbf{k}$  aus 1. BZ, jedes koppelt nur  $\mathbf{k}$ -Werte, die sich  $\mathbf{G}$  unterscheiden

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Rightarrow \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad \text{Indizierung mit } \mathbf{k} \text{ möglich: } E(\mathbf{k}) = E_{\mathbf{k}}$$

→  $\mathbf{k}$  ist nicht auf 1. BZ beschränkt, zu jedem  $\mathbf{k}$  aus 1. BZ gibt es unendlich viele Lösungen (Energieeigenwerte)

$$E_n(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n) \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}_n = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3, \quad n = \text{Bandindex}$$

- **Bloch-Wellen im Ortsraum:**

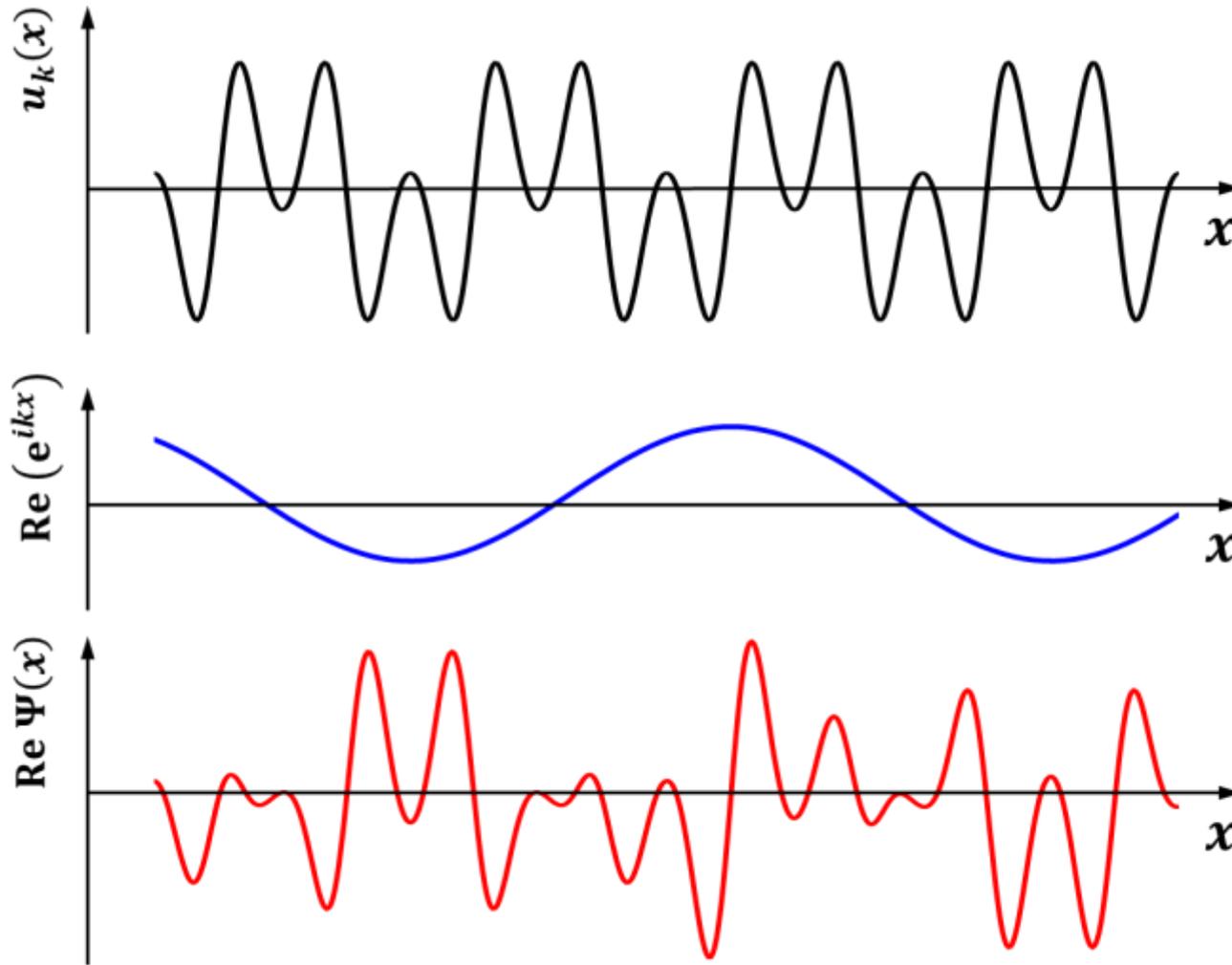
$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad \text{mit} \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

**Bloch-Theorem**

die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung für ein periodisches Potenzial  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  sind durch das Produkt von ebenen Wellen  $e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  mit einer gitterperiodischen Funktion  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  gegeben

# 8.1 Bloch-Elektronen

- Bloch-Wellen im Ortsraum



$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

# 8.1.1 Bloch-Elektronen im Ortsraum

- Konsequenzen aus Periodizität des Gitterpotenzials

$$\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}'} C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{G}'} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{G}'} C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{G}'} e^{-i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

Umbenennung des Summationsindex:  $\mathbf{G}'' = \mathbf{G}' - \mathbf{G}$  bzw.  $\mathbf{G}' = \mathbf{G}'' + \mathbf{G}$

$$\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}''} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}''} e^{-i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

wichtiges Ergebnis:  $\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

➔ Bloch-Wellen, deren Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  sich um  $\mathbf{G}$  unterscheiden, sind identisch

- um den Index  $\mathbf{k}$  einer Bloch-Wellen eindeutig festzulegen, wählt man  $\mathbf{k}$  aus der 1. Brillouin-Zone  
sollte  $\mathbf{k}'$  nicht in 1. BZ liegen, so können wir immer einen reziproken Gittervektor  $\mathbf{G}$  finden, so dass  $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}$  in 1. BZ liegt
- durch Reduktion der Wellenvektoren auf die 1. BZ gibt es zu jedem  $\mathbf{k}$  mehrere Energieeigenwerte, die wir mit dem zusätzlichen Bandindex  $n$  klassifizieren:  $E_n(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)$

# 8.1.3 Impuls von Bloch-Elektronen

- Welchen Impuls haben Bloch-Wellen?

- Wiederholung: Impuls von freien Elektronen (ebene Wellen)

ebene Wellen  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  sind Eigenfunktionen des Impulsoperators  $\frac{\hbar}{i} \nabla$

für ebene Wellen es gilt:  $\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar \mathbf{k} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  → ebene Wellen  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  sind Eigenzustände des Impulsoperators und besitzen wohldefinierten Impuls  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$

- da Wellenzahl  $\mathbf{k}$  von Bloch-Wellen nur bis auf  $\mathbf{G}$  eindeutig definiert ist, können wir  $\hbar \mathbf{k}$  nicht als Impuls auffassen

für Bloch-Wellen es gilt:  $\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i} \nabla (u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) = \hbar \mathbf{k} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \neq \text{const.} \cdot \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

→ Bloch-Wellen  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  sind keine Eigenzustände des Impulsoperators

- $\hbar \mathbf{k}$  ist „**Kristallimpuls**“ oder „**Quasi-Impuls**“ (ähnlich zu Impuls von Phononen)
- Ursache ist **diskrete Translationsinvarianz** wegen Gitterperiodizität im Unterschied zur kontinuierlichen Translationsinvarianz beim freien Elektronengas

- Gruppengeschwindigkeit einer Bloch-Welle

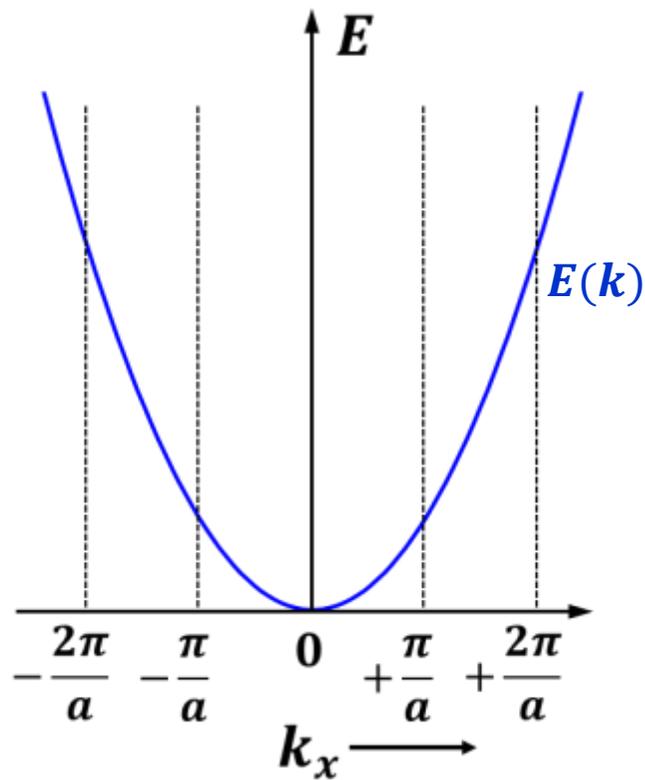
$$\mathbf{v}_{n,\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \omega_n(\mathbf{k})$$

→ Gruppengeschwindigkeit wird durch Bandstruktur  $E_n(\mathbf{k})$  bestimmt

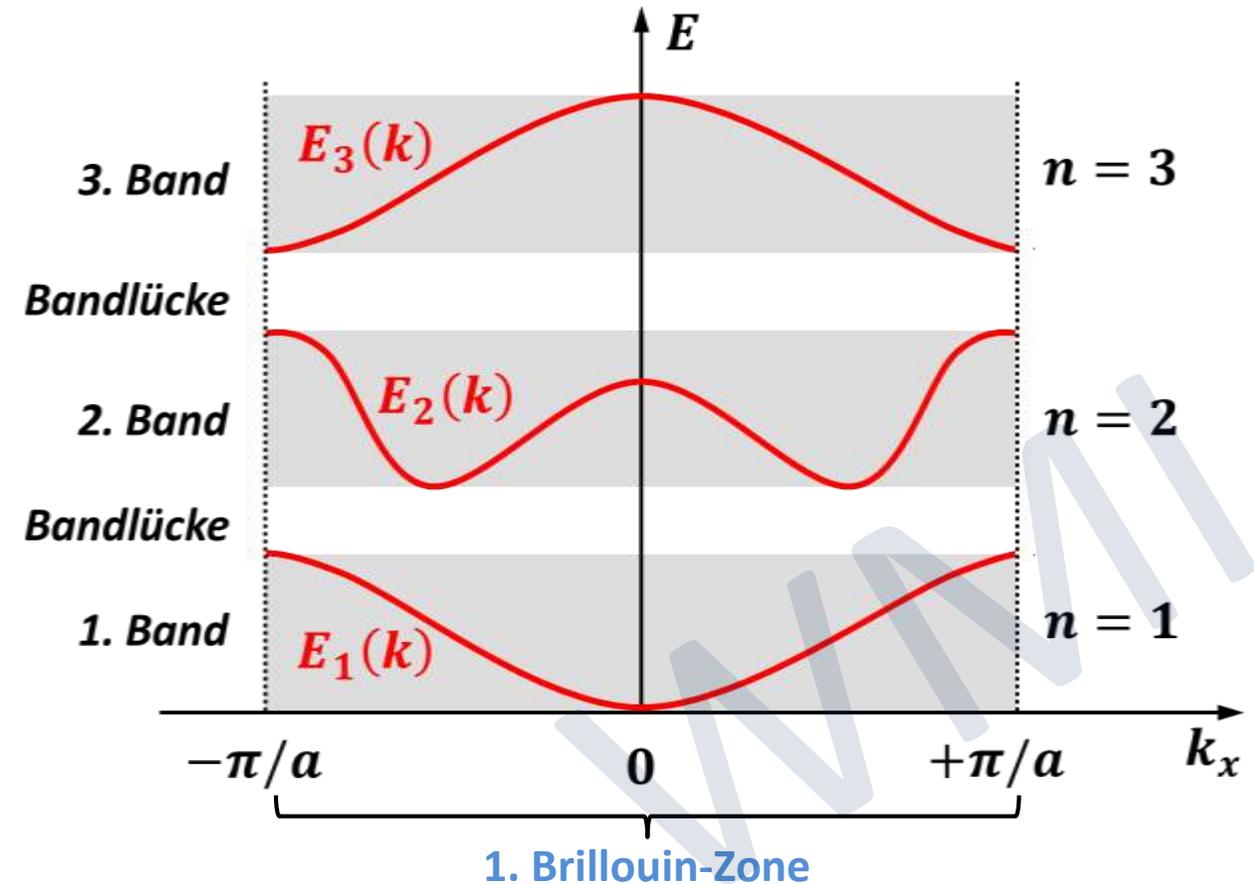
# 8.1.4 Dispersionsrelation und Bandstruktur

- Schrödinger-Gleichung liefert für jeden erlaubten  $k$ -Wert aus 1. Brillouin-Zone einen Satz von Eigenenergien  $E_n(\mathbf{k})$
- die Funktionen  $E_n(\mathbf{k})$  bilden die **elektronische Bandstruktur** eines Festkörpers

qualitatives Bild der Energiebänder  $E_n(\mathbf{k})$



freie Elektronen



Bloch-Elektronen

# 8.1.4 Dispersionsrelation und Bandstruktur

- allgemeine Eigenschaften von  $E_n(\mathbf{k})$  als Folge der Periodizität des Gitterpotenzials

- aus Schrödinger-Gleichung erhalten wir für die Zustände  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k} + \mathbf{G}_n$

$$\mathcal{H} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

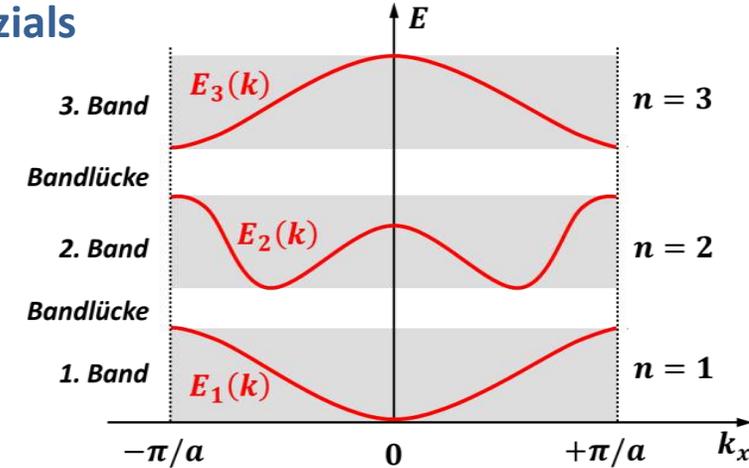
$$\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\mathcal{H} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_n}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n) \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_n}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$



$$E_n(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)$$

$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_n$  beliebig,  $\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}$

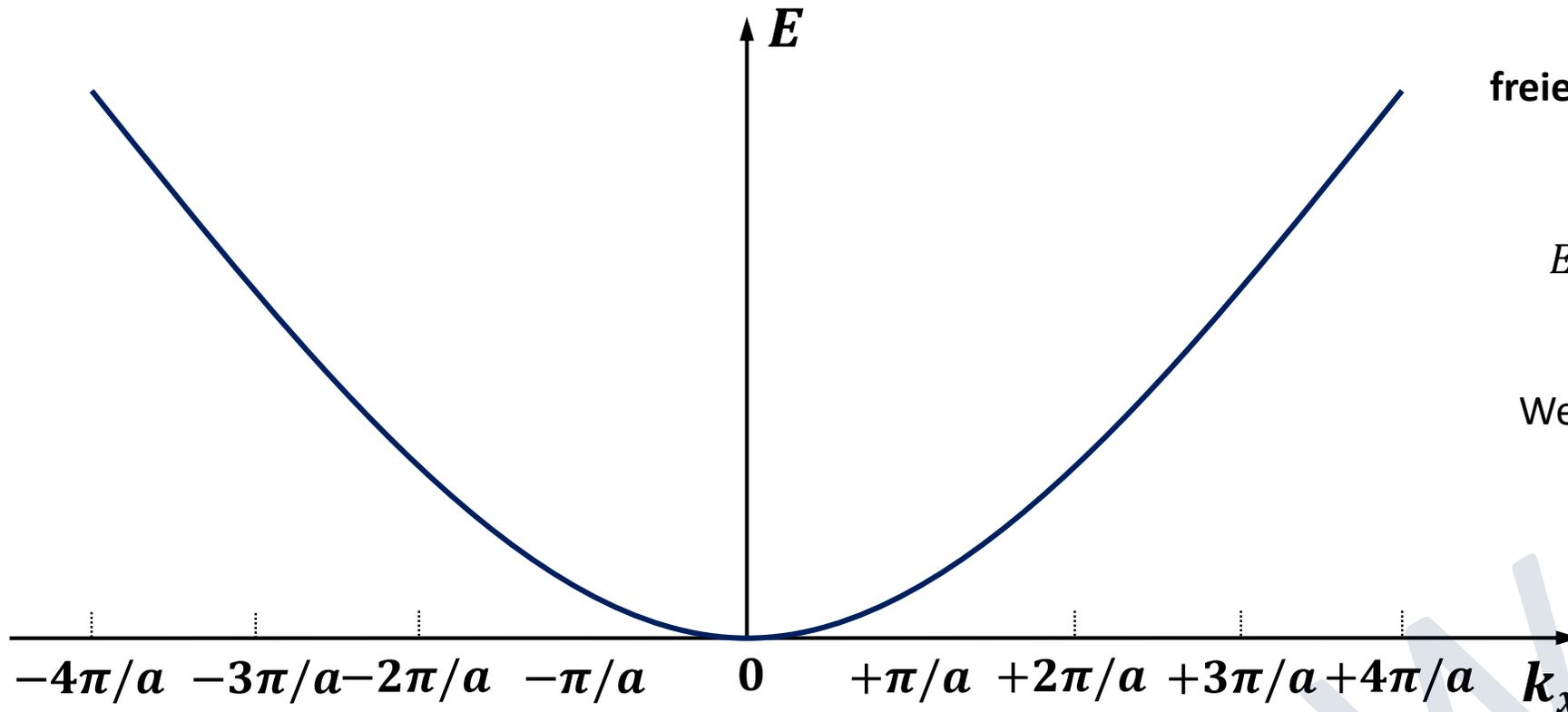


- Folgerungen:

- $E_n(\mathbf{k})$  sind **periodische Funktionen** von  $\mathbf{k}$ : Beschränkung auf 1. BZ möglich
- $E_n(\mathbf{k})$  sind als periodische Funktionen beschränkt
  - $\rightarrow E_n(\mathbf{k})$  überdecken nur einen bestimmten Energiebereich: **Energiebänder** mit endlicher **Bandbreite**
- die Energiebänder  $E_n(\mathbf{k})$  sind durch verbotene Bereiche getrennt: **Energie- oder Bandlücken**
- falls Gitterpotenzial Inversionssymmetrie besitzt:  $V(r) = V(-r)$ 
  - $\rightarrow E_n(\mathbf{k}) = E_n(-\mathbf{k})$  **(ohne Beweis)**
  - $\rightarrow \mathbf{v}_{n,\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) = 0$  für  $\mathbf{k} = 0 \rightarrow$  Minimum oder Maximum von  $E_n(\mathbf{k})$  für  $\mathbf{k} = 0$
- Kramers-Entartung:  $E_n(\mathbf{k}, \uparrow) = E_n(-\mathbf{k}, \downarrow)$  **(ohne Beweis)**
  - $\rightarrow$  folgt aus Zeitumkehrinvarianz des Hamilton-Operators für  $B = 0$

# 8.1.5 Reduziertes Zonenschema

- Plausibilitätsbetrachtung zu Energiebändern:  
 → freies Elektronengas



freies Elektronengas:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

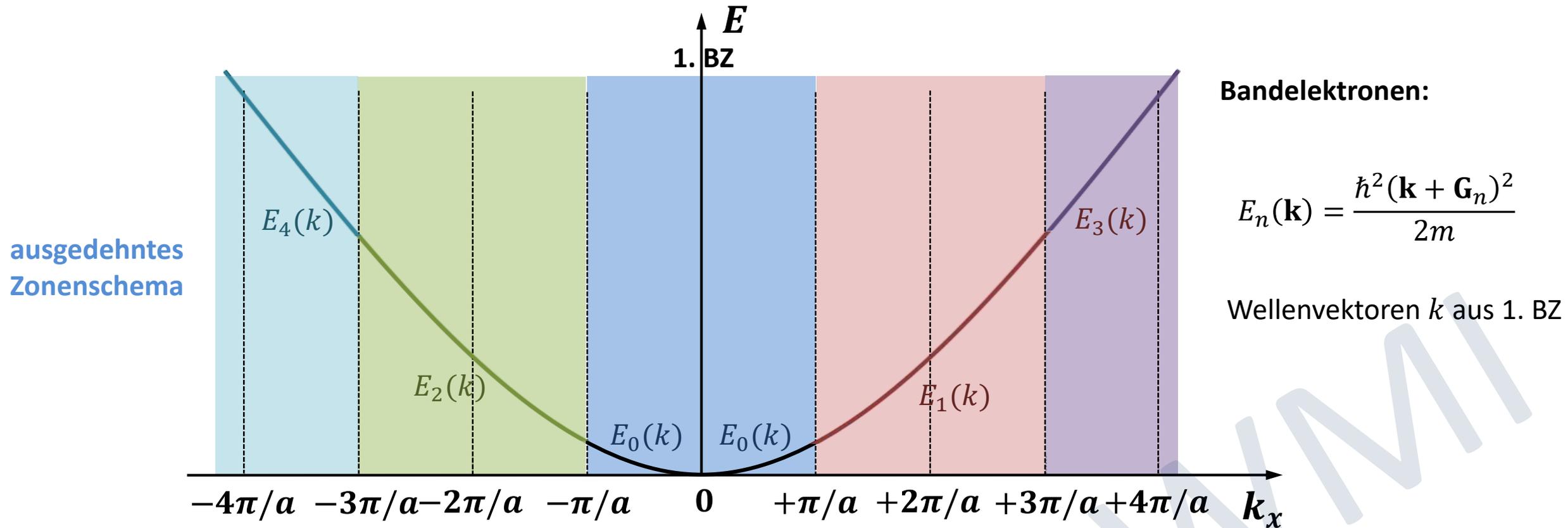
Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  beliebig

### Hinweis:

Bei Elektronenwellen im Festkörper besteht kein Grund dafür, den Wellenvektor auf die 1. BZ zu beschränken. Im Gegensatz zu den Gitterschwingungen, bei denen wir die Bewegung diskreter Gitterpunkte beschrieben haben und deshalb Wellenvektoren außerhalb der 1. BZ physikalisch nicht sinnvoll waren, sind Elektronenwellen überall im Festkörper definiert

# 8.1.5 Reduziertes Zonenschema

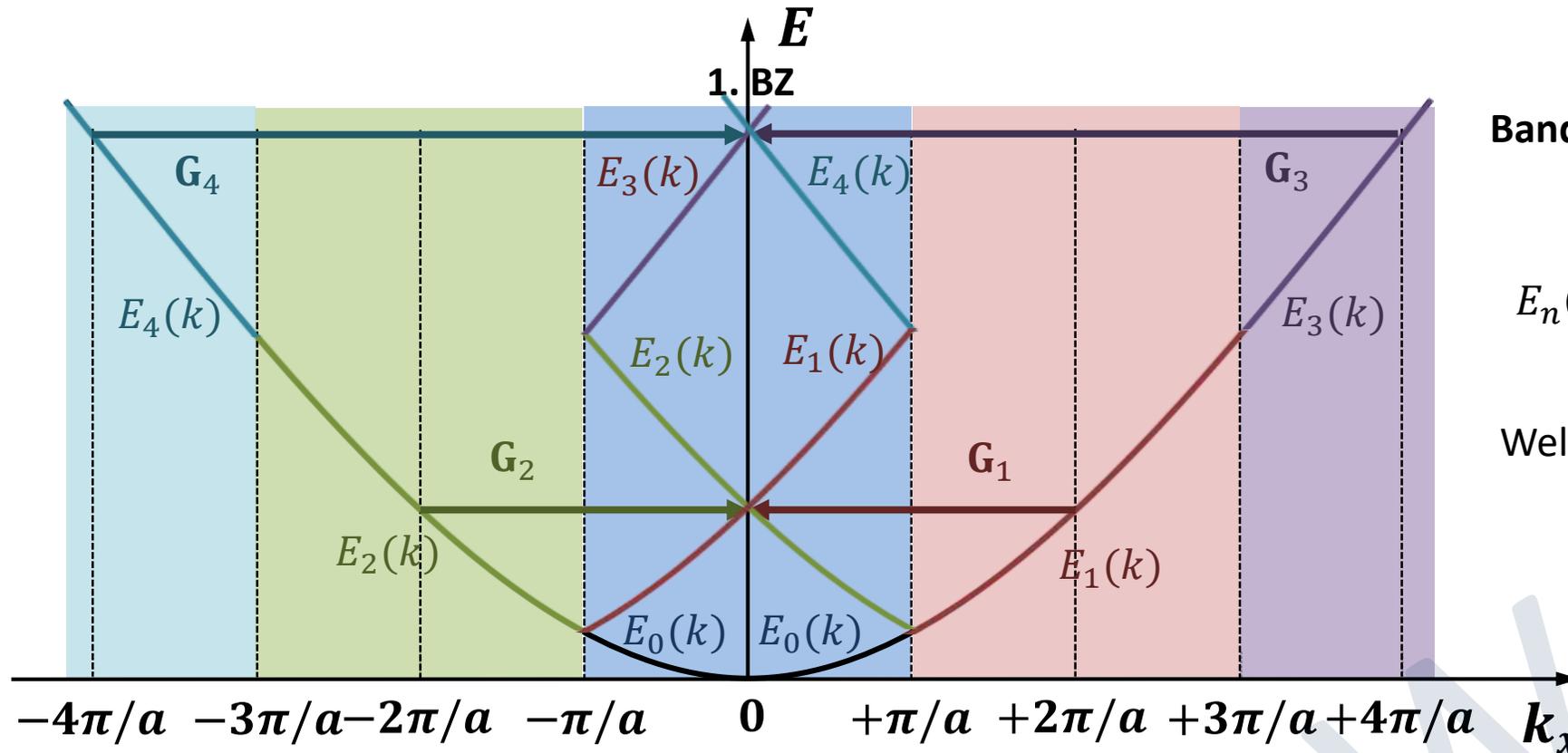
- Plausibilitätsbetrachtung zu Energiebändern:
  - freies Elektronengas mit periodischem Potenzial der Amplitude null



→ durch Einführung einer periodischen Struktur mit Periode  $a$  im Ortsraum führen wir periodische Struktur im  $k$ -Raum mit Periode  $2\pi/a$  ein

# 8.1.5 Reduziertes Zonenschema

- Plausibilitätsbetrachtung zu Energiebändern:
  - freies Elektronengas mit periodischem Potenzial der Amplitude null



Bandelektronen:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)^2}{2m}$$

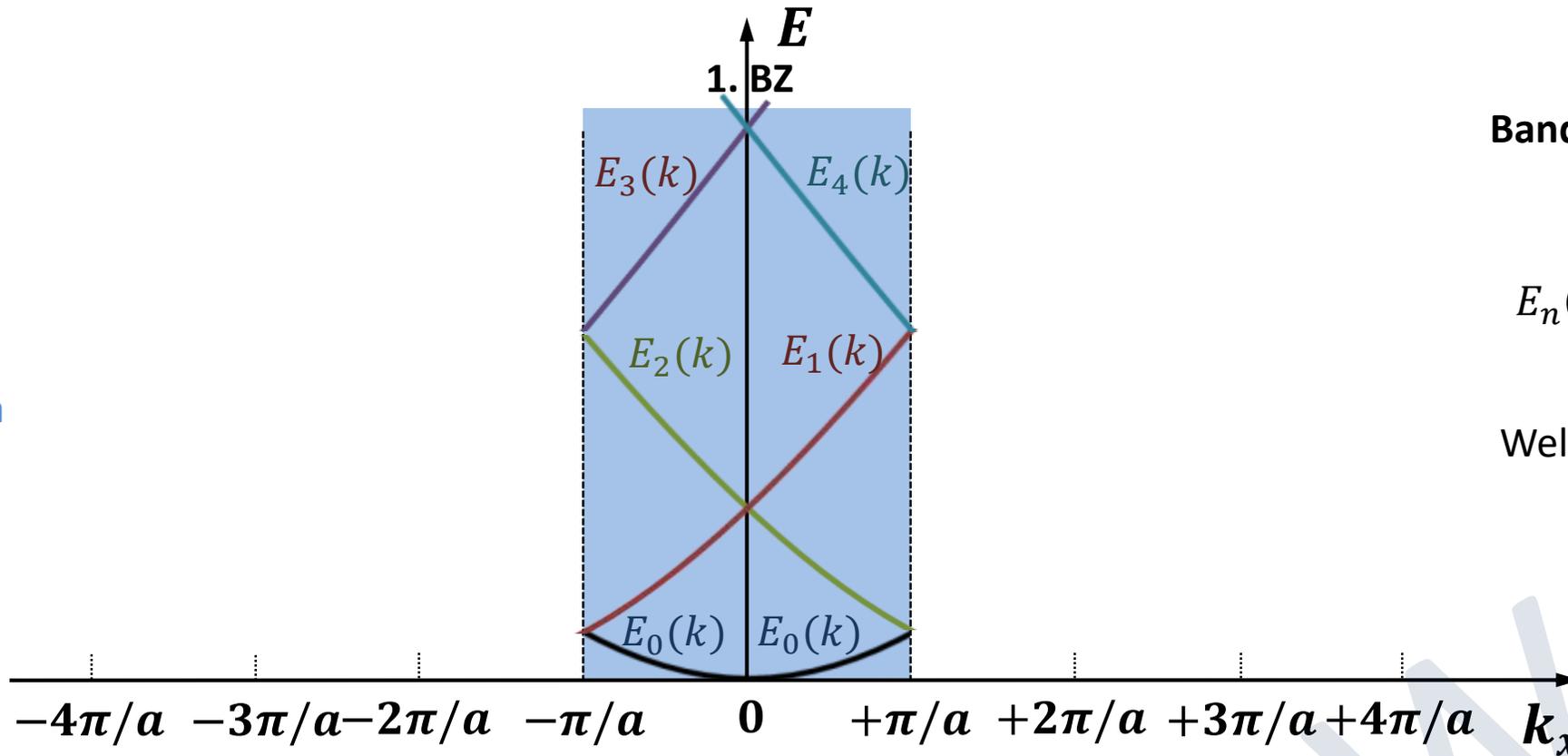
Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  aus 1. BZ

- durch Einführung einer periodischen Struktur mit Periode  $a$  im Ortsraum führen wir periodische Struktur im  $k$ -Raum mit Periode  $2\pi/a$  ein
- zurückfalten der Kurven  $E_n(\mathbf{k})$  in 1. BZ durch Verschieben mit reziprokem Gittervektor  $G_n = \pm n \cdot 2\pi/a$

# 8.1.5 Reduziertes Zonenschema

- Plausibilitätsbetrachtung zu Energiebändern:
  - freies Elektronengas mit periodischem Potenzial der Amplitude null

reduziertes  
Zonenschema



Bandelektronen:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)^2}{2m}$$

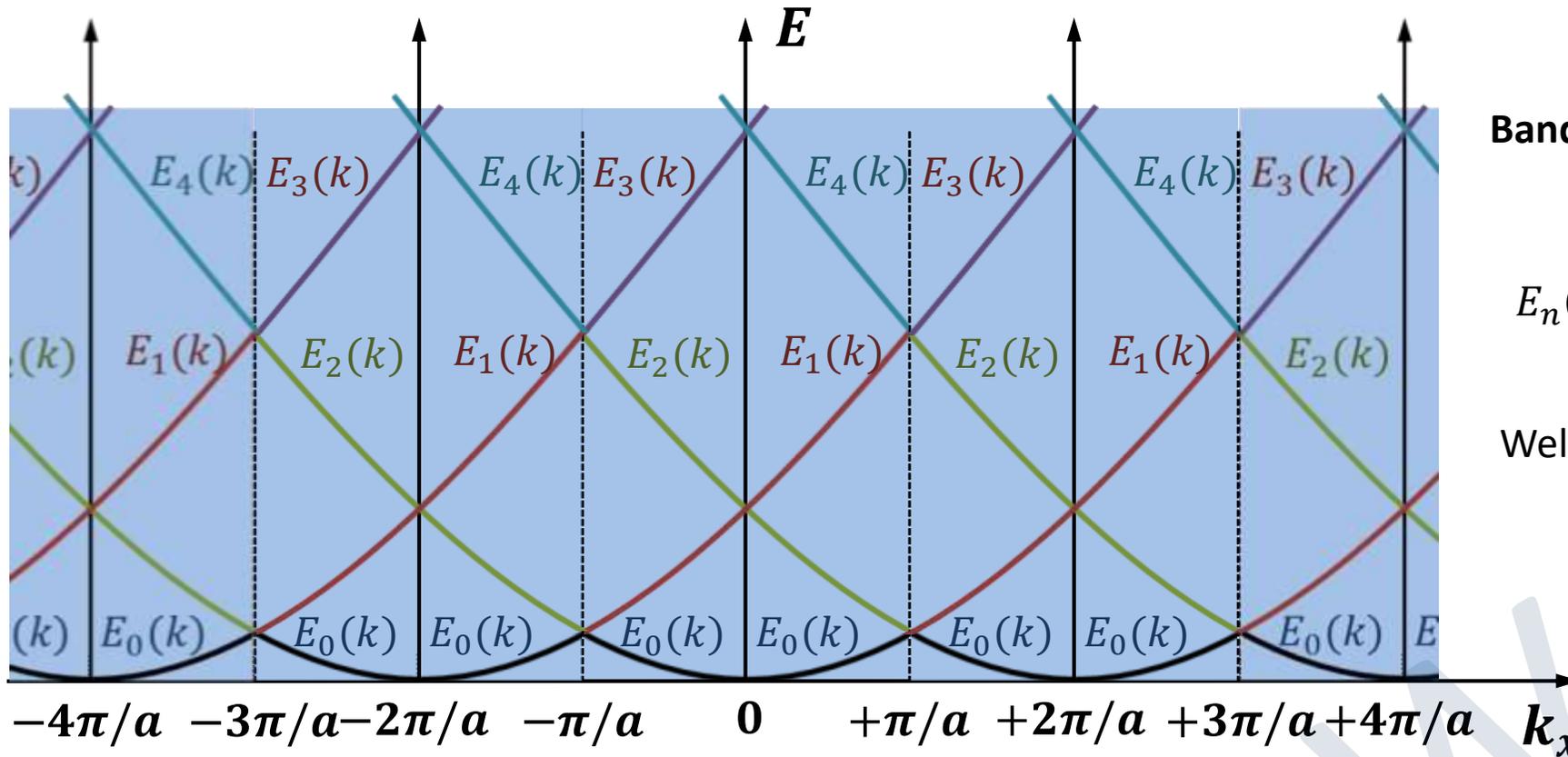
Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  aus 1. BZ

- durch Einführung einer periodischen Struktur mit Periode  $a$  im Ortsraum führen wir periodische Struktur im  $k$ -Raum mit Periode  $2\pi/a$  ein
- zurückfalten der Kurven  $E_n(\mathbf{k})$  in 1. BZ durch Verschieben mit reziprokem Gittervektor  $\mathbf{G}_n = \pm n \cdot 2\pi/a$
- Darstellung aller Energiefunktionen  $E_n(\mathbf{k})$  in 1. BZ

# 8.1.5 Reduziertes Zonenschema

- Plausibilitätsbetrachtung zu Energiebändern:
  - freies Elektronengas mit periodischem Potenzial der Amplitude null

periodisches Zonenschema



Bandelektronen:

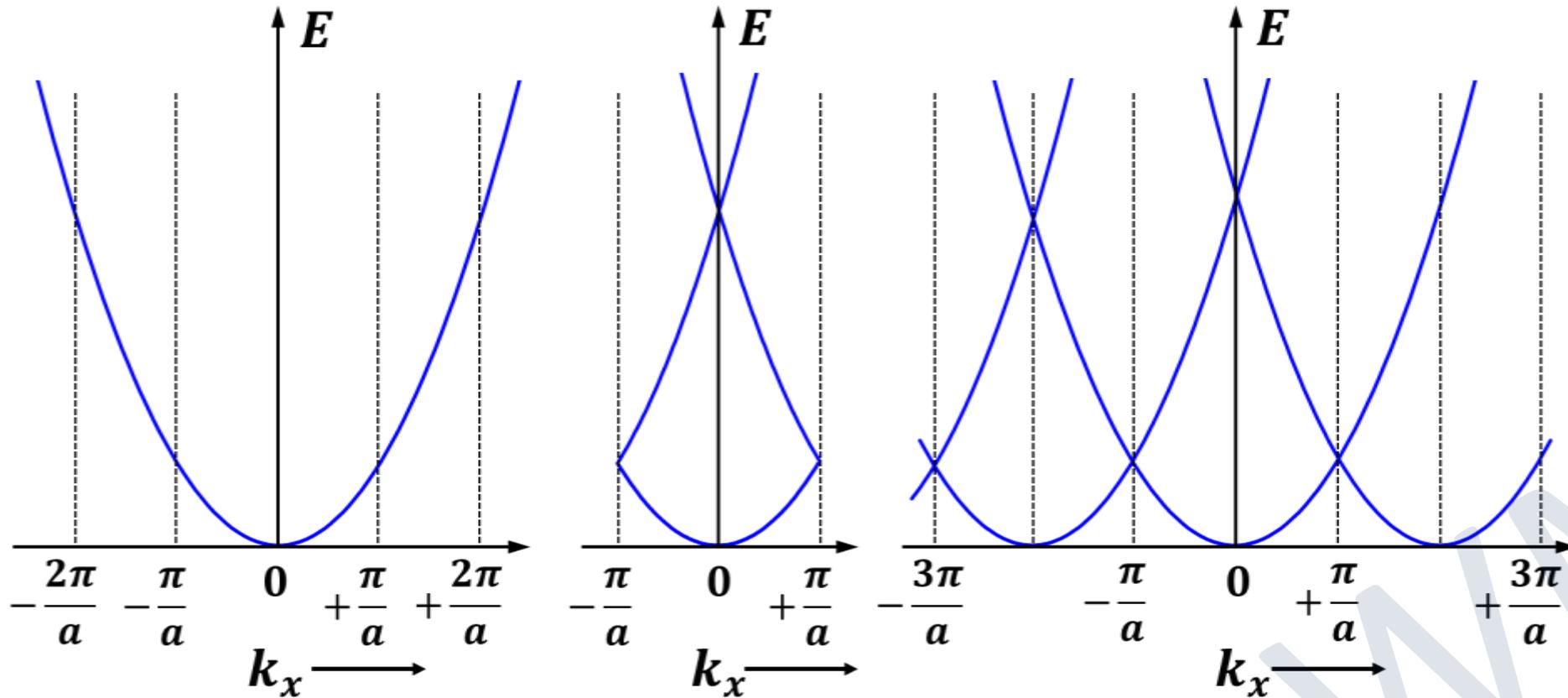
$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)^2}{2m}$$

Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  aus 1. BZ

- durch Einführung einer periodischen Struktur mit Periode  $a$  im Ortsraum führen wir periodische Struktur im  $k$ -Raum mit Periode  $2\pi/a$  ein
- zurückfalten der Kurven  $E_n(\mathbf{k})$  in 1. BZ durch Verschieben mit reziprokem Gittervektor  $\mathbf{G}_n = \pm n \cdot 2\pi/a$
- periodische Darstellung aller Energiefunktionen  $E_n(\mathbf{k})$

# 8.1.5 Reduziertes Zonenschema

- ausgedehntes, reduziertes und periodisches Zonenschema für ein 1D freies Elektronengas mit periodischem Potenzial der Amplitude null



ausgedehntes  
Zonenschema

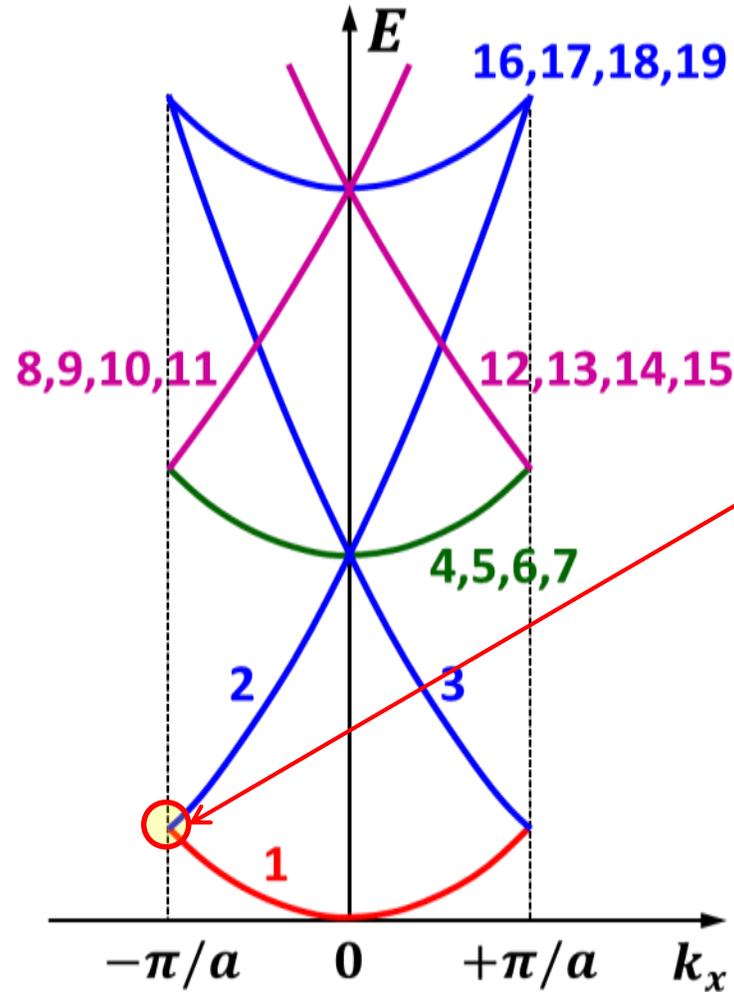
reduziertes  
Zonenschema

periodisches  
Zonenschema

äquivalente  
Darstellungen

# 8.1.5 Reduziertes Zonenschema

- reduziertes Zonenschema für 3D freies Elektronengas in einfach kubischem Gitter



$V(\mathbf{r}) = 0$ , periodischer FK (kubischer Kristall)

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( k_x + h \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \left( k_y + k \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \left( k_z + \ell \frac{2\pi}{a} \right)^2 \right]$$

$(hk\ell) = (000) \Rightarrow n = 1$   
 $(hk\ell) = (100) \Rightarrow n = 2$

Energieentartung am Zonenrand

Bandindex	$(h, k, \ell)$	$E_n(0, 0, 0)$	$E_n(k_x, 0, 0)$
1	000	0	$k_x^2$
2	100	$\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$	$\left(k_x + \frac{2\pi}{a}\right)^2$
3	$\bar{1}00$	$\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$	$\left(k_x - \frac{2\pi}{a}\right)^2$
4,5,6,7	010, 0 $\bar{1}$ 0, 001, 00 $\bar{1}$	$\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$	$k_x^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$
8,9,10,11	110, 1 $\bar{1}$ 0, 101, 10 $\bar{1}$	$2 \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$	$\left(k_x + \frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$
12,13,14,15	$\bar{1}10, \bar{1}\bar{1}0, \bar{1}01, \bar{1}0\bar{1}$	$2 \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$	$\left(k_x - \frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$
16,17,18,19	011, 0 $\bar{1}$ 1, 01 $\bar{1}$ , 0 $\bar{1}\bar{1}$	$2 \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$	$k_x^2 + 2 \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$

# 8.2 Näherung der fast freien Elektronen

- bisher diskutiert:

→ freies Elektronengas mit gitterperiodischem Potenzial der Amplitude null:  $V(\mathbf{r}) = 0$

Dispersion  $E(\mathbf{k})$  kann in 1. Brillouin-Zone dargestellt werden (reduziertes Zonenschema)

$$E(\mathbf{k}) \Rightarrow E_n(\mathbf{k}) \text{ mit } \mathbf{k} \in 1. \text{ Brillouin-Zone}$$

- wir diskutieren jetzt:

→ Elektronen in gitterperiodischem Potenzial einer Amplitude größer null:  $V(\mathbf{r}) > 0$

→ Amplitude des gitterperiodischen Potenzials soll klein sein

→ störungstheoretische Behandlung

→ Näherung der fast freien Elektronen

→ Wie ändert sich Dispersionsrelation  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$  der freien Elektronen, wenn wir Amplitude des gitterperiodischen Potenzial endlich machen

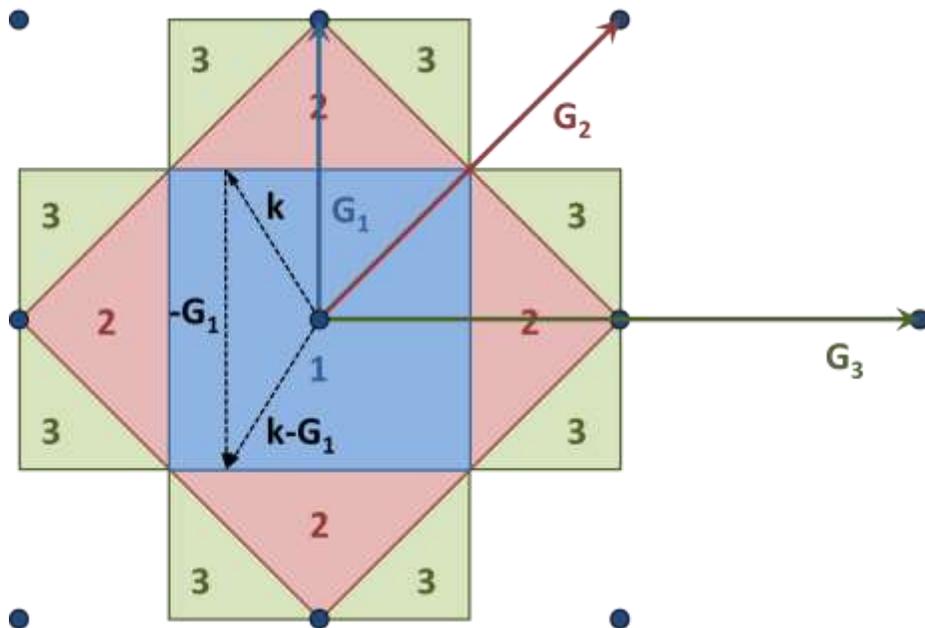


# 8.2.1 Qualitative Diskussion

- für  $V(\mathbf{r}) > 0$  erhalten wir Bloch-Wellen  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$  anstelle von ebenen Wellen  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$
- Welche Rolle spielen die einzelnen Entwicklungskoeffizienten in  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$ 
  - wir gehen von Schrödinger-Gleichung in  $k$ -Raum aus

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0 \quad \Rightarrow \quad C_{\mathbf{k}} = -\frac{\sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}}{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)}$$

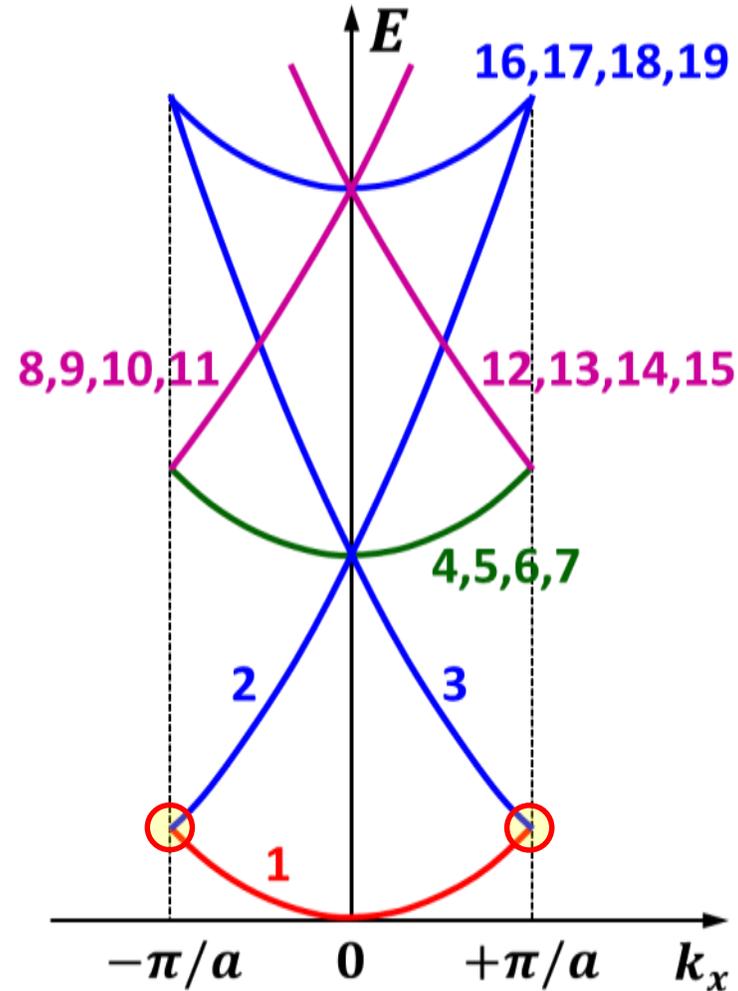
Entwicklungskoeffizienten werden groß, wenn  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E = \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{G}_n)^2}{2m}$  bzw.  $k^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{G}_n)^2$



- Bedingung erfüllt für  $\mathbf{k}$  in der Nähe des Rands der Brillouin-Zonen
- Für Elektronenwellen mit solchen  $\mathbf{k}$ -Werten ist die von Laue-Bedingung erfüllt
- Elektronen mit  $\mathbf{k}$  in der Nähe eines Zonenrands erfahren starke Rückstreuung  $\rightarrow$  stehende Wellen
- Elektronen mit  $\mathbf{k}$  weit weg vom Zonenrand werden wenig beeinflusst  $\rightarrow$  weiter in guter Näherung ebene Wellen

# 8.2.1 Qualitative Diskussion

- Diskussion anhand eines 1D periodischen Potentials mit Gitterperiode  $a$



- wir betrachten nur Rand der 1. BZ bei  $k = \pm\pi/a$  und bezeichnen den kürzesten reziproken Gittervektor  $G_1 = 2\pi/a$  mit  $g$

für  $k = +\pi/a$  gilt:

$$k^2 = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \quad (k - g)^2 = \left(\frac{\pi}{a} - \frac{2\pi}{a}\right)^2 = \left(-\frac{\pi}{a}\right)^2 = k^2$$

für  $k = -\pi/a$  gilt:

$$k^2 = \left(-\frac{\pi}{a}\right)^2 \quad (k - g)^2 = \left(-\frac{\pi}{a} + \frac{2\pi}{a}\right)^2 = \left(+\frac{\pi}{a}\right)^2 = k^2$$

**am Rand der 1. BZ bei  $k = \pm\pi/a$  müssen wir nur die beiden Entwicklungskoeffizienten  $C_{-\pi/a}$  und  $C_{+\pi/a}$  berücksichtigen**

alle anderen Entwicklungskoeffizienten können in 0-ter Näherung vernachlässigt werden

# 8.2.1 Qualitative Diskussion

- resultierende Bloch-Wellen:  $\Psi_k(x) = C_k e^{i k x} \pm C_{k-g} e^{i(k-g)x}$

für  $k = \pi/a$  erhalten wir:

$$\Psi_{k=\pi/a}(x) = C_{+\pi/a} e^{i \frac{\pi}{a} x} \pm C_{-\pi/a} e^{-i \frac{\pi}{a} x}$$

für  $k = -\pi/a$  erhalten wir:

$$\Psi_{k=-\pi/a}(x) = C_{-\pi/a} e^{-i \frac{\pi}{a} x} \pm C_{+\pi/a} e^{i \frac{\pi}{a} x}$$

**symmetrische und antisymmetrische Überlagerung einer fortlaufenden und einer reflektierten Welle gleicher Amplitude**

→ **stehende Wellen**

- **stehende Wellen**

$$\Psi^s(x) \propto (e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a}) \propto \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

symmetrische Überlagerung

$$\Psi^a(x) \propto (e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a}) \propto \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

antisymmetrische Überlagerung

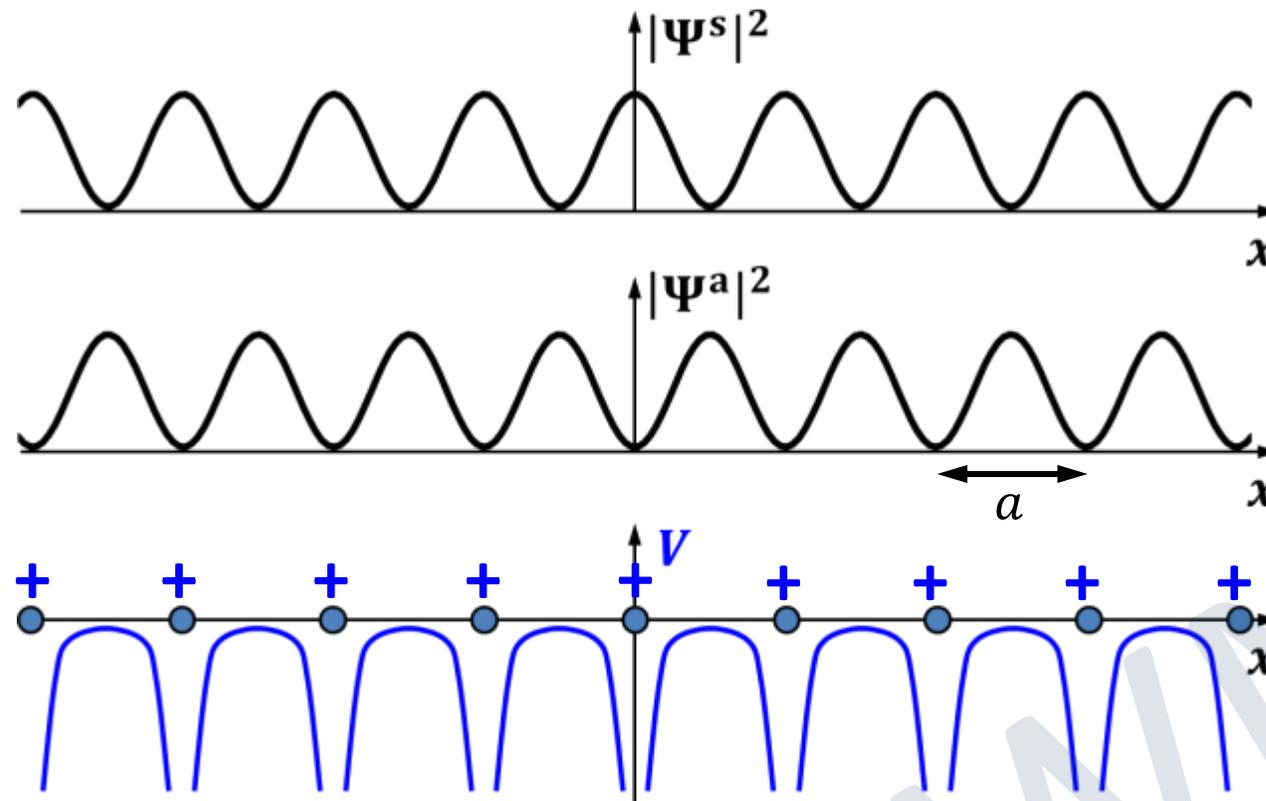


# 8.2.1 Qualitative Diskussion

- zu stehende Wellen gehörige zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichten (entspricht Elektronendichten)

$$|\Psi^s(x)|^2 \propto \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

$$|\Psi^a(x)|^2 \propto \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$



unterschiedliche potenzielle Energie für beide Elektronenverteilungen:  $E_{\text{pot}}^s < E_{\text{pot}}^a$

- ➔ Aufhebung der Entartung der Energieeigenwerte
- ➔ Energielücke am Rand der BZ

# 8.2.1 Qualitative Diskussion

- qualitativer Verlauf der Dispersionsrelation am Rand der 1. Brillouin-Zone

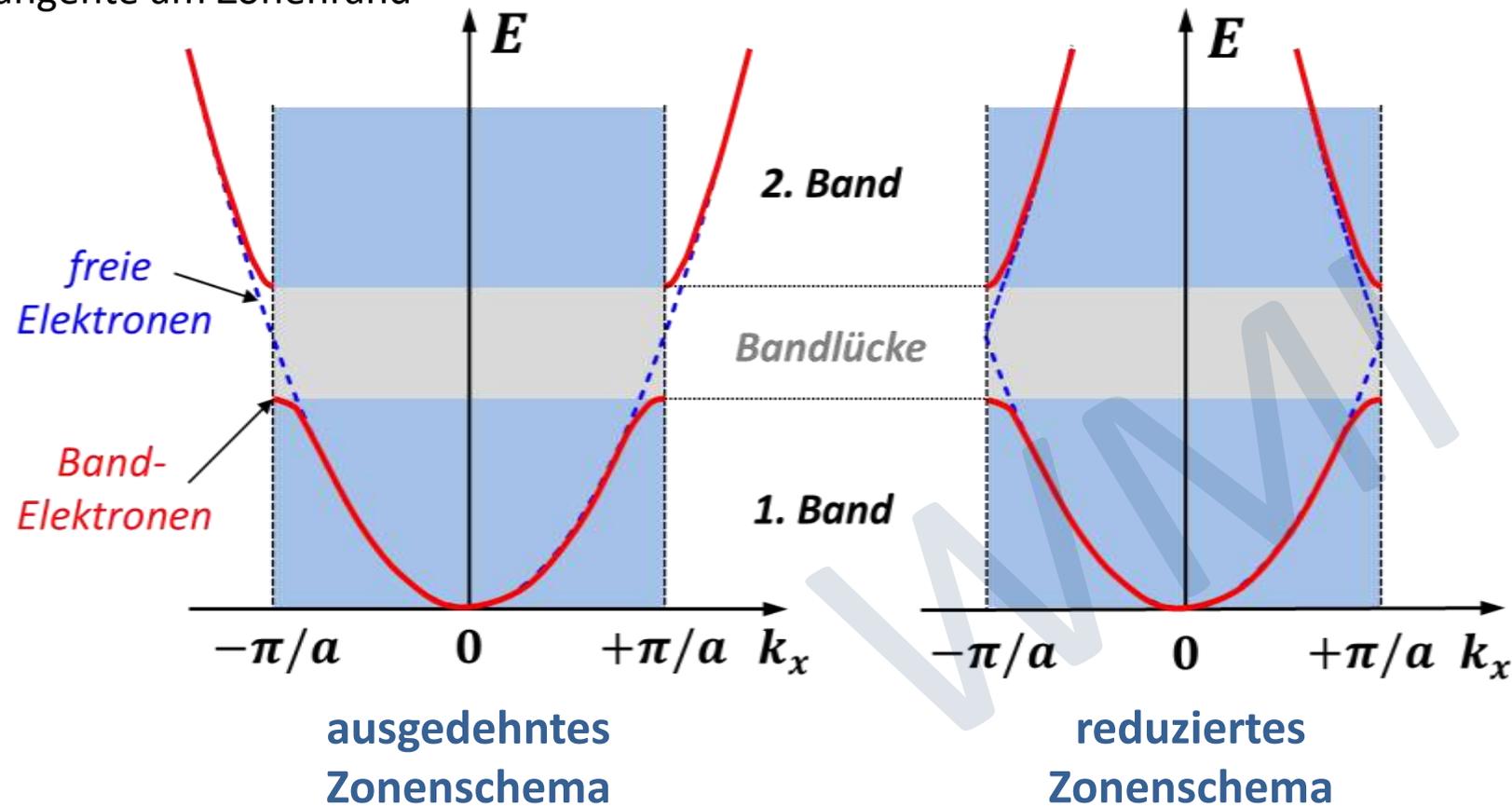
– stehende Welle für  $k = \pm\pi/a$ :

➤  $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) = 0$

➤  $E_n(\mathbf{k})$  besitzt waagrechte Tangente am Zonenrand

für  $V(\mathbf{r}) > 0$  öffnet sich am Zonenrand eine Energielücke

Größe der Energielücke hängt von Amplitude des gitterperiodischen Potentials ab



# 8.2.2 Quantitative Diskussion

- wir gehen von Schrödinger-Gleichung im  $k$ -Raum aus

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0$$

- die Wellenvektoren können beliebige Werte annehmen (die durch Randbedingungen erlaubt sind)
- liegt  $\mathbf{k}'$  außerhalb der 1. BZ, so können wir immer  $\mathbf{G}$  finden, so dass  $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}$  in 1. BZ liegt

$$\left(\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}'} V_{\mathbf{G}'} C_{\underbrace{\mathbf{k}-\mathbf{G}-\mathbf{G}'}_{\mathbf{k}'}} = 0$$

Umbenennung:  $\mathbf{G}'' = \mathbf{G}' + \mathbf{G}$

$$\left(\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}''} V_{\mathbf{G}''-\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}''} = 0$$

**Aufgabe besteht in Lösung des Gleichungssystems**

- falls Gitterpotenzial verschwindet, erhalten wir

$$\left(\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0$$

- es müssen alle  $C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0$  sein
- resultierende Bloch-Welle  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} = C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  ist ebene Welle

# 8.2.2 Quantitative Diskussion

- Lösen des Gleichungssystems

$$\left( \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}''} V_{\mathbf{G}''-\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}''} = 0$$

Teil des Gleichungssystems für eindimensionales System

→ wir schreiben alle  $\mathbf{G} = n\mathbf{g}$  als Vielfaches von  $\mathbf{g}$  und verwenden die Abkürzung  $\lambda_{\mathbf{k}-n\mathbf{g}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - n\mathbf{g})^2$

$$\begin{array}{cccccccc}
 \dots & + \dots = 0 \\
 (\lambda_{\mathbf{k}-2\mathbf{g}} - E) C_{\mathbf{k}-2\mathbf{g}} & + \dots & + V_{-2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}} & + V_{-\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} & + V_0 C_{\mathbf{k}-2\mathbf{g}} & + V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-3\mathbf{g}} & + V_{2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-4\mathbf{g}} & + \dots = 0 \\
 (\lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} - E) C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} & + \dots & + V_{-2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} & + V_{-\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}} & + V_0 C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} & + V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-2\mathbf{g}} & + V_{2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-3\mathbf{g}} & + \dots = 0 \\
 (\lambda_{\mathbf{k}} - E) C_{\mathbf{k}} & + \dots & + V_{-2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+2\mathbf{g}} & + V_{-\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} & + V_0 C_{\mathbf{k}} & + V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} & + V_{2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-2\mathbf{g}} & + \dots = 0 \\
 (\lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} - E) C_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} & + \dots & + V_{-2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+3\mathbf{g}} & + V_{-\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+2\mathbf{g}} & + V_0 C_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} & + V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}} & + V_{2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} & + \dots = 0 \\
 (\lambda_{\mathbf{k}+2\mathbf{g}} - E) C_{\mathbf{k}+2\mathbf{g}} & + \dots & + V_{-2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+4\mathbf{g}} & + V_{-\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+3\mathbf{g}} & + V_0 C_{\mathbf{k}+2\mathbf{g}} & + V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} & + V_{2\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}} & + \dots = 0 \\
 \dots & + \dots = 0
 \end{array}$$

# 8.2.2 Quantitative Diskussion

- Block der Determinante der Koeffizienten

$$\begin{array}{ccccc}
 (\lambda_{k-2g} + V_0 - E) & V_{-g} & V_{-2g} & V_{-3g} & V_{-4g} \\
 V_g & (\lambda_{k-g} + V_0 - E) & V_{-g} & V_{-2g} & V_{-3g} \\
 V_{2g} & V_g & (\lambda_k + V_0 - E) & V_{-g} & V_{-2g} \\
 V_{3g} & V_{2g} & V_g & (\lambda_{k+g} + V_0 - E) & V_{-g} \\
 V_{4g} & V_{3g} & V_{2g} & V_g & (\lambda_{k+2g} + V_0 - E)
 \end{array}$$

- vereinfachende Annahmen, um Gleichungssystem einfach lösen zu können:
  - periodisches Potenzial kann mit nur einer Fourier-Komponente  $V_g$  beschrieben werden*
  - wir berücksichtigen nur die Koeffizienten  $C_k$  und  $C_{k-g}$*

### Hinweis:

Die Koeffizienten  $V_G$  der Fourier-Reihe nehmen z.B. für ein Coulomb-Potenzial mit  $1/G^2$  ab, weshalb in der Reihenentwicklung meist nach wenigen Termen abgebrochen werden kann.

# 8.2.2 Quantitative Diskussion

- stark reduziertes Gleichungssystem

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}} + V_0 C_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} = 0$$

$$\left(\frac{\hbar^2 (\mathbf{k}-\mathbf{g})^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} + V_0 C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} + V_{-\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}} = 0$$

- Gleichungssystem besitzt Lösungen, wenn Determinante verschwindet

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E + V_0 & V_{\mathbf{g}} \\ V_{-\mathbf{g}} & \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}-\mathbf{g})^2}{2m} - E + V_0 \end{vmatrix} = 0$$

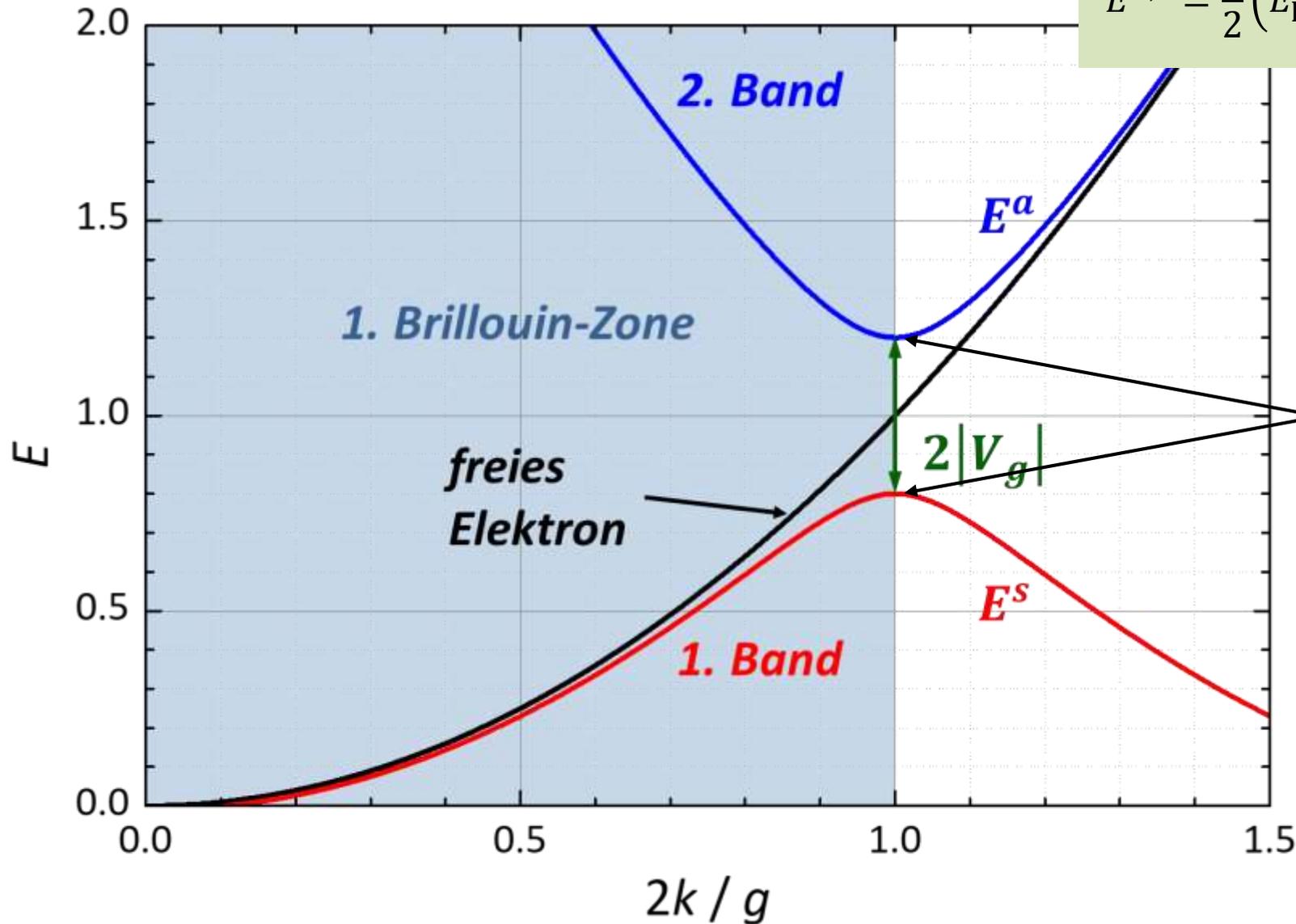
- mit  $E_{\mathbf{k}}^0 = V_0 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$  und  $E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 = V_0 + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}-\mathbf{g})^2}{2m}$  erhalten wir (Energie der freien Elektronen)

$$E^{a,s} = \frac{1}{2} \left( E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 + E_{\mathbf{k}}^0 \right) \mp \sqrt{\frac{1}{4} \left( E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 - E_{\mathbf{k}}^0 \right)^2 + |V_{\mathbf{g}}|^2}$$

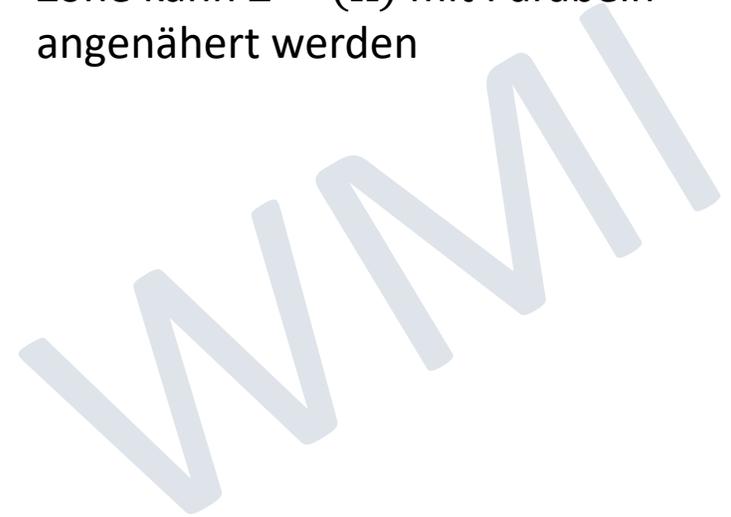
→ Energielücke  $E_g = E^a - E^s = 2|V_g|$  am Rand der Brillouin-Zone

# 8.2.2 Quantitative Diskussion

$$E^{a,s} = \frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 + E_{\mathbf{k}}^0) \pm \sqrt{\frac{1}{4} (E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 - E_{\mathbf{k}}^0)^2 + |V_g|^2}$$



in der Nähe des Rands der Brillouin-Zone kann  $E^{a,s}(\mathbf{k})$  mit Parabeln angenähert werden



# 8.2.2 Quantitative Diskussion

- Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten

$$\text{Bloch-Welle: } \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} e^{i (\mathbf{k}-\mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}}$$

- Einsetzen der Energieeigenwerte in Gleichungssystem

$$\left( \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}} + V_0 C_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} = 0$$

$$\left( \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{g})^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} + V_0 C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} + V_{-\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}} = 0$$

$$\left. \frac{C_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}}{C_{\mathbf{k}}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{g}/2} = \frac{E_{\mathbf{k}}^0 \pm |V_{\mathbf{g}}| - E_{\mathbf{k}}^0}{V_{\mathbf{g}}} = \pm 1$$

am Rand der Brillouin-Zone bei  $\mathbf{k} = \mathbf{g}/2$

$$\Psi_{\mathbf{g}/2}^{a,s}(\mathbf{r}) = C (e^{i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}/2} \pm e^{-i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}/2})$$

**stehende Welle**

welche der beiden Überlagerung die niedrigere Energie besitzt, hängt von Vorzeichen von  $V_{\mathbf{g}}$  ab

• **Elektronen im periodischen Potenzial Auswirkungen der Gitterperiodizität:**

$$\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Bloch-Wellen zu Wellenzahlen, die sich um  $\mathbf{G}$  unterscheiden, sind identisch

$$E_n(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)$$

$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_n$  beliebig,  $\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}$

$E_n(\mathbf{k})$  sind **periodische Funktionen**

$E_n(\mathbf{k})$  sind beschränkt  $\rightarrow$  **Energiebänder** und **Bandlücken**

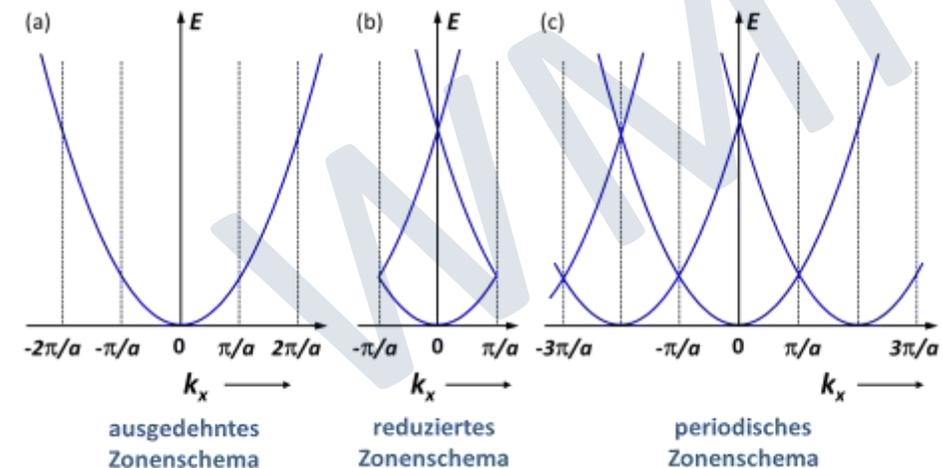
• **allgemeine Eigenschaften von  $E_n(\mathbf{k})$ :**

- $E_n(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)$   $\rightarrow$  Beschränkung auf 1. BZ möglich
- $E_n(\mathbf{k})$  sind beschränkt  $\rightarrow$  **Energiebänder** (*Bandbreite, Bandlücken*)
- falls  $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$   $\rightarrow E_n(\mathbf{k}) = E_n(-\mathbf{k})$  (Inversionssymmetrie)
- Kramers-Entartung  $\rightarrow E_n(\mathbf{k}, \uparrow) = E_n(-\mathbf{k}, \downarrow)$  (Zeitumkehrinv. für  $B = 0$ )

- **Kristallimpuls:** - Periodizität des Gitterpotenzials  $\rightarrow \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- $\hbar\mathbf{k}$  ist nur bis auf  $\mathbf{G}$  eindeutig  $\rightarrow$  „**Kristallimpuls**“,  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  kein Eigenzustand von  $\frac{\hbar}{i}\nabla$
- Gruppengeschwindigkeit von Blochwelle:  $\mathbf{v}_{n,\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}E_n(\mathbf{k})$

• **Darstellung der Dispersion  $E_n(\mathbf{k})$  im ausgedehnten, reduzierten und periodischen Zonenschema ( $V(\mathbf{r}) = 0$ )**

$$E_n(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)$$



## • Energiebänder, reduziertes Zonenschema:

Beispiel: 3D Elektronengas in einfach kubischem Gitter,  $V(\mathbf{r}) = 0$

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( k_x + h \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \left( k_y + k \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \left( k_z + \ell \frac{2\pi}{a} \right)^2 \right]$$

$V(\mathbf{r}) = 0$ , periodischer FK

## • Modell fast freier Elektronen: qualitative Betrachtung:

freie Elektronen + periodisches Potenzial als Störung,  $V(\mathbf{r}) \neq 0$

- von Laue-Bedingung  $\mathbf{k}^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{g})^2$  ist am Zonenrand erfüllt

- Überlagerung von fortlaufender und rückgestreuter Elektronenwelle

$$\Psi^s(x) \propto (e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a}) \propto \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

$$\Psi^a(x) \propto (e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a}) \propto \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

- **stehende Wellen** am Zonenrand:  $\mathbf{v}_{n,\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) = 0$

## • Modell fast freier Elektronen: quantitative Behandlung

einfachster Fall: 
$$E^{a,s} = \frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 + E_{\mathbf{k}}^0) \pm \sqrt{\frac{1}{4} (E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 - E_{\mathbf{k}}^0)^2 + |V_g|^2}$$

- Aufhebung der  $E$ -Entartung am Zonenrand  $\rightarrow$  **Bandlücke**  $2|V_g|$

