

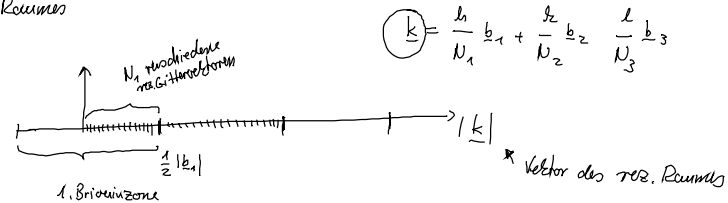
4.2. Kristallelektronen

Wdh.: Bloch'sches Theorem: Eigenfunktionen von $H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r})$ mit $V(\underline{r}) = V(\underline{r} + \underline{R})$

lassen sich schreiben als $\psi_{n\mathbf{k}}(\underline{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}} u_{n\mathbf{k}}(\underline{r})$ wobei

$$u_{n\mathbf{k}}(\underline{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\underline{r} + \underline{R}),$$

Discretisierung des reziproken Raumes



Entwicklung von $\psi(\underline{r}) = \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}}$
 * alle rez. Gittervektoren

$$= \sum_{\mathbf{k} \in 1. BZ} \sum_{\mathbf{G}} F(\mathbf{k} - \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{G})\cdot\underline{r}}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\psi_{\mathbf{k}}(\underline{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}} u_{n\mathbf{k}}(\underline{r})}$

Bandindex n : $\psi_{n\mathbf{k}}(\underline{r})$ einsetzen in $H \psi_{n\mathbf{k}} = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}} u_{n\mathbf{k}}(\underline{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r}) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{im} \mathbf{k} \cdot \nabla + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2}_{\frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} \text{ "k dot p"}} \right) u_{n\mathbf{k}}(\underline{r})$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{r}} \underbrace{\left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{k})^2 + V(\underline{r}) \right]}_{H(\mathbf{k})} u_{n\mathbf{k}}(\underline{r})$$

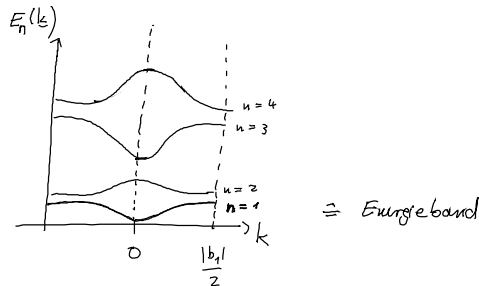
$$\stackrel{!}{=} \underline{E_n(\mathbf{k})} \psi_{n\mathbf{k}}$$

$$\rightarrow \boxed{H(\underline{k}) u_{n\underline{k}}(\underline{r}) = E_n(\underline{k}) u_{n\underline{k}}(\underline{r})} \quad (I)$$

$E_n(\underline{k})$ ist Eigenwert zur Eigenwertgleichung (I) mit Randbedingungen $u_{n\underline{k}}(\underline{r}) = u_{n\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R})$.

\rightarrow diskretes Eigenwertspektrum da $H(\underline{k})$ ein Hermitescher Op. auf endlichem Grundgebiet.

$$n = 1, 2, 3, \dots$$



es gilt: $\boxed{E(\underline{k}) = E(-\underline{k})}$

Kramer'sches Theorem

(allgemein gültig wegen
zeitumkehrinvarianz)

$$\left. \begin{aligned} \text{Beweis: } \int_{\underline{R}} \psi_{n\underline{k}}^*(\underline{r}) &= e^{-i\underline{k} \cdot \underline{R}} \psi_{n\underline{k}}^*(\underline{r}) \\ \int_{\underline{R}} \psi_{n, -\underline{k}}(\underline{r}) &= e^{-i\underline{k} \cdot \underline{R}} \psi_{n, -\underline{k}}(\underline{r}) \end{aligned} \right\} \psi_{n\underline{k}}^* = \psi_{n, -\underline{k}}$$

wegen Hermitizität von H : $\psi_{n\underline{k}}^*$ und $\psi_{n\underline{k}}$ sind entartet bzgl. H

$\rightarrow \psi_{n, -\underline{k}}$ und $\psi_{n\underline{k}}$ sind " " "

\rightarrow d.h. $E(-\underline{k}) = E(\underline{k})$

• Entwicklung um festes \underline{k} :

Störungstheoretische Entwicklung um \underline{k} für kleines $\underline{\epsilon}$:

$$E_n(\underline{k} + \underline{\epsilon}) = E_n(\underline{k}) + i\underline{\epsilon} \cdot \nabla_{\underline{k}} E_n(\underline{k}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \epsilon_i \epsilon_j \frac{\partial^2 E_n(\underline{k})}{\partial k_i \partial k_j} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (1)$$

$$H(\underline{k} + \underline{\epsilon}) u_{n, \underline{k} + \underline{\epsilon}} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \hbar \underline{\epsilon} + \hbar \underline{k} \right)^2 + V(\underline{r}) \right] u_{n, \underline{k} + \underline{\epsilon}}$$

$$= \left[\underbrace{\hat{H}^0}_{\hat{H}^0} + \underbrace{\frac{1}{m} \hbar \underline{\epsilon} \cdot (\hat{p} + \hbar \underline{k})}_{\hat{H}^1} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\epsilon}^2}_{\hat{H}^2} \right] u_{n, \underline{k} + \underline{\epsilon}} \quad \text{noch exakt!} \quad (2)$$

nichtentartete Störungstheorie

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1 + \hat{H}^2, \quad \hat{H}^0 u_{n\mathbf{k}} = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}$$

$$(2') \quad E_n(\mathbf{k} + \mathbf{k}') = E_n(\mathbf{k}) + H_{nn}^1 + \sum_{n' \neq n} \frac{|H_{nn'}^1|^2}{E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k})} + H_{nn}^2 + \dots$$

$$\begin{aligned} \text{mit } H_{nn'}^1 &:= \langle u_{n\mathbf{k}} | \hat{H}^1 | u_{n'\mathbf{k}} \rangle = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \int d^3r u_{n\mathbf{k}}^* (\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{k}) u_{n'\mathbf{k}} \\ &= \hbar \frac{\mathbf{k}}{m} \underbrace{\int d^3r \varphi_{n\mathbf{k}}^* \hat{\mathbf{p}} \varphi_{n'\mathbf{k}}}_{P_{nn'}} \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich von (1) und (2')

$$0(\mathbf{k}) : \quad \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{m} \langle P \rangle \quad \langle P \rangle = \underline{P}_{nn}$$

Gruppen geschwindigkeit = \langle Geschwindigkeitsop. \rangle

$$\boxed{v_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E}$$

$$0(\mathbf{k}^2) : \quad \frac{1}{2} \sum_{i,j} \hbar v_{gi} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \sum_{n' \neq n} \frac{\left| \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot P_{nn'} \right|^2}{E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k})}$$

\uparrow H_{nn}^2 \nwarrow von $|H^1|^2$

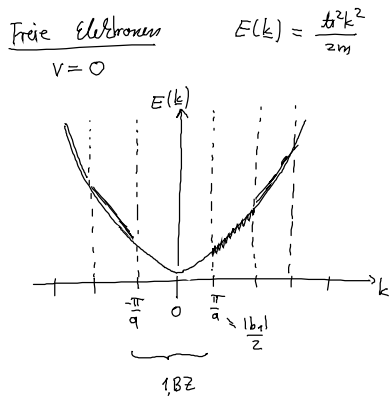
$$\rightarrow \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{m} \delta_{ij} + \frac{1}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{P_{nn'}^i P_{n'n}^j + P_{nn'}^j P_{n'n}^i}{E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k})}$$

Tensor der inversen effektiven Masse (bestimmt Dynamik der Kristallelektronen)

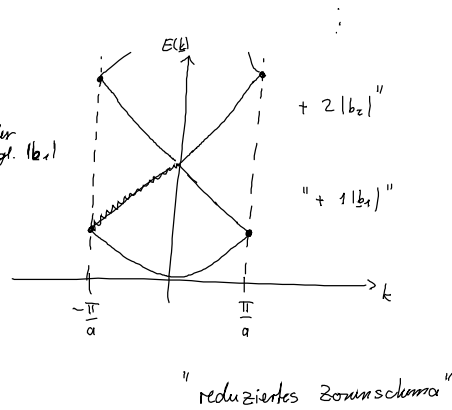
Kristallelektronen sind Quasiteilchen, die WW mit statischem Gitter bereits enthalten:

	freies Elektron	Kristallelektron
Wellenfkt	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
Energie eigenwert	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$E_n(\mathbf{k})$ Bandstruktur
Impuls $\langle P \rangle$	$\hbar \mathbf{k}$	$\frac{\hbar}{m} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k})$
$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$	$\frac{1}{m} \delta_{ij}$	Tensor der inv. eff. Masse
Erzeuger Op.	$a_{\mathbf{k}}^\dagger$	$a_{n\mathbf{k}}^\dagger$

4.3. Näherung für fast freies Elektron



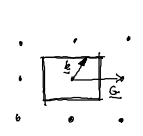
ausnutzen der Periodizität bzgl. $|b_1|$



"ausgedehntes Brillouinschema"

• Bandindex n ergibt sich aus reziproken Gittervektor

• Entartung am Rand der BZ:



$$k \cdot G = -\frac{1}{2} G^2$$

beschreibt Ebene \perp zum Verbindungsgeraden zwischen rez. Gittervektoren $\hat{=}$ Brillouinzone

• Potenzial $V(x) \neq 0$ hebt Entartung auf

\rightarrow schwaches Potenzial und Störungsrechnung gibt Größe der Energielücke

Erinnerung an Fourier-transformierte Schrödingergl.:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (k - G)^2 - E(k) \right] F(k - G) + \sum_{G'} V(G' - G) F(k - G') = 0$$

gewählt

$E^{(0)}(k - G)$

$$V(r) = \sum_G V(G) e^{iG \cdot r}$$

$$\psi_k(r) = e^{i k \cdot r} \sum_G F(k - G) e^{-i G \cdot r}$$

$$\Rightarrow F(k - G) = \sum_{G'} \frac{V(G' - G)}{E^{(0)}(k - G) - E(k)} F(k - G') \quad (*) \text{ (noch exakt)}$$

0. Näherung: "freies Elektron" $E(k) = E^{(0)}(k)$

$$F^{(0)}(k - G) = \delta_{G,0} \rightarrow \text{ebene Welle}$$

\rightarrow einsetzen in (*) ergibt

$$F^{(1)}(k - G) = \frac{V(G)}{E^{(0)}(k - G) - E^{(0)}(k)} \leftarrow \text{1te Näherung für } F(k - G)$$

dies einsetzen in Schrödingergl.

$$E(k) = E^{(0)}(k) + \sum_{G' \neq 0} \frac{V(G') V(G)}{E^{(0)}(k) - E^{(0)}(k - G')}$$

Rayleigh-Schrödinger
Störungsreihe

nur gut falls $E^{(0)}(k) \neq E^{(0)}(k - G')$
d.h. nicht am Zonengrand.

d.h. divergierende Terme aus Summe müssen einzeln
betrachtet werden

$$E(k) = E^{(0)}(k) + \frac{|V(G_1)|^2}{E(k) - E^{(0)}(k - G_1)} + \sum_{\substack{G' \neq 0 \\ G' \neq G_1}} \frac{V(G')^2}{E^{(0)}(k) - E^{(0)}(k - G')}$$

↑
nicht in 1. Näherung

(k am Zonengrand
d.h. $k - G_1 = \frac{1}{2} G_1$)

quadratische Gl. für $E(k)$

↑
Term ist klein

$$E(k) = \frac{1}{2} \left[E^{(0)}(k) + E^{(0)}(k - G_1) \pm \sqrt{\left[E^{(0)}(k) - E^{(0)}(k - G_1) \right]^2 + 4|V(G_1)|^2} \right]$$

