

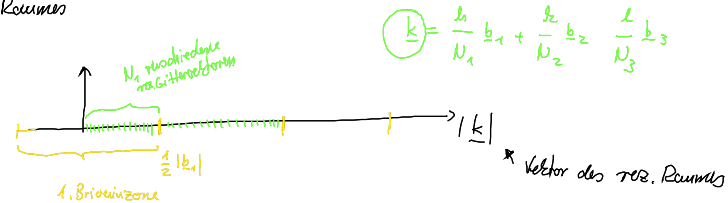
## 4.2. Kristallelektronen

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

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

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

Discretisierung des reziproken Raumes



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

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

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

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

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

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

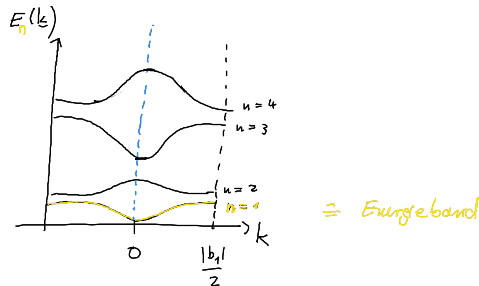
$$\stackrel{!}{=} \underline{E_n(\mathbf{k})} \psi_{n\mathbf{k}}$$

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

$E_n(\underline{k})$  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  $\underline{\epsilon}$ :

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

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

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.  $\rangle$

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

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

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

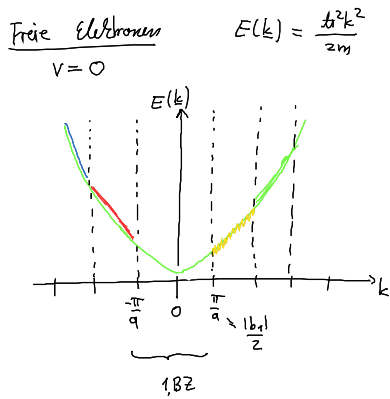
$$\rightarrow \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{m} \delta_{ij} + \frac{1}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{P_{nn'}^i P_{n'n}^j + P_{nn'}^j P_{n'n}^i}{E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k})}$$

Tensor der inversen effektiven Masse (bestimmt Dynamik der Kristallelektronen)

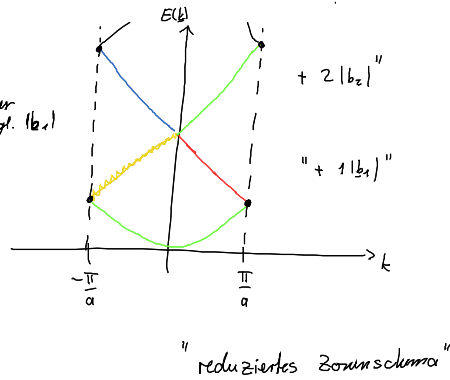
Kristallelektronen sind Quasiteilchen, die WW mit statischem Gitter bereits enthalten:

	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



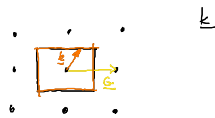
ausnutzen der Periodizität bzgl.  $|k_1|$



"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 Verbindungsvektor zwischen rez. Gittervektoren  
 $\hat{=}$  Brillouinzone

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

$\rightarrow$  schwaches Potenzial und Störungsrechnung gibt Größe der Energielücke

Erinnerung an Fourier-transformierte Schrödingergl.:

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

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

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

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

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

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

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

$\rightarrow$  einsetzen in (\*) ergibt

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

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 Zontrand.

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 Zontrand  
d.h.  $k \approx \frac{1}{2} G_1$  )

quadratische Gl. für  $E(k)$

↑  
Term ist klein

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

