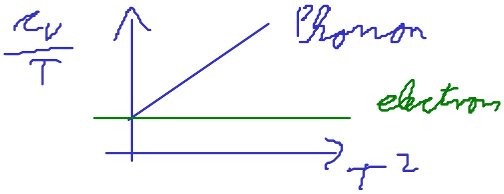
Auslandsstudium: Infoveranstaltung am 17.12.2009
$14^{\underline{00}}$ Uhr in 3.01

repetition

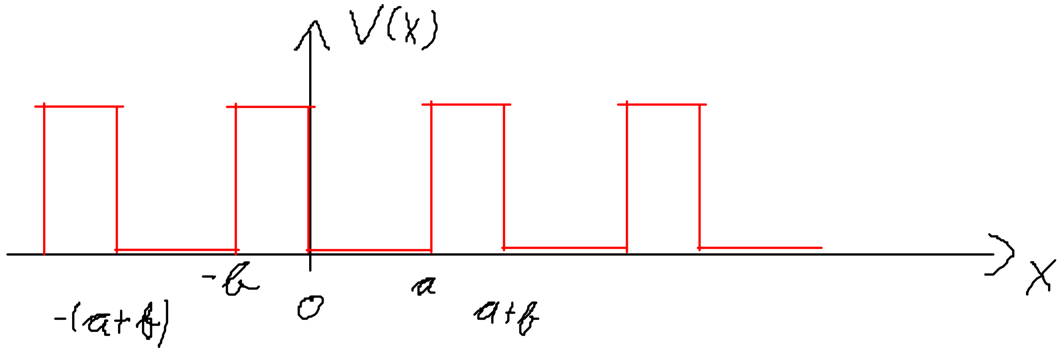
heat capacity of metal with Fermi-Gas



electrons in periodic potential

Kronig – Penney – Modell (1931)

(Näherung des Potentials)



$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\Psi = E\Psi$$

Ansatz: $0 < x < a$: $\Psi(x) = A e^{iKx} + B e^{-iKx}$

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

$-b < x < 0$ $\quad \Psi(x) = C e^{Qx} + D e^{-Qx}$

$$V-E = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}$$

Periodischer Lösungsansatz:

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

Stetigkeitsbedingungen:

$$x=0 \quad \begin{cases} A+B = C+D \\ iR(A-B) = Q(C-D) \end{cases}$$

für $x=a$ $\quad \{ \; \cdots \quad \Leftrightarrow \quad \det(\cdots)=0$

$$\Rightarrow \frac{Q^2-R^2}{2QR}\left(\sinh(Qb)\sin(Ra) + \cosh(Qb)\cos(Ra)\right) = \cos k(a+b)$$

(?)

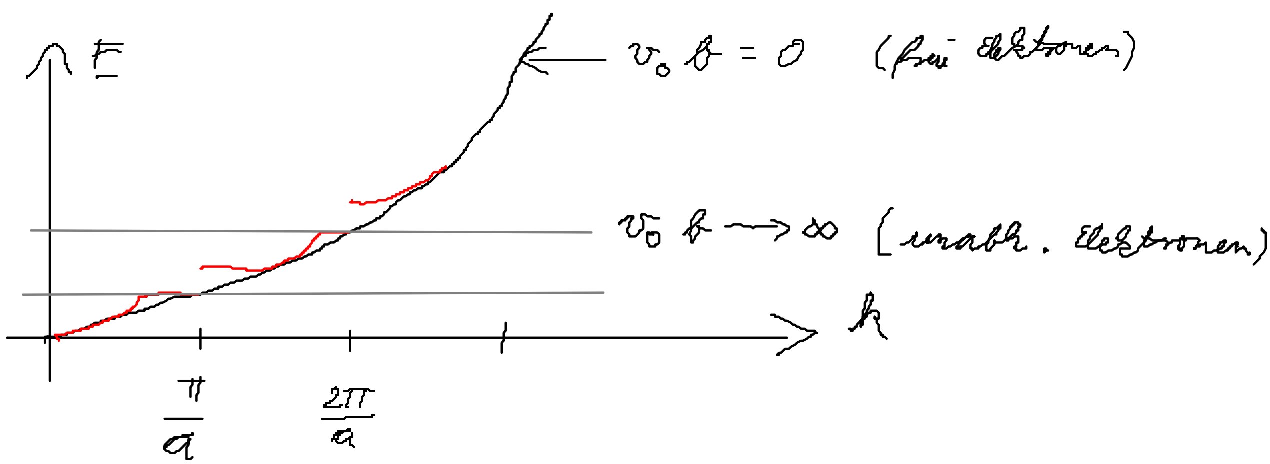
für δ-Funktion $(b=0,\ V(0)=\infty)$

$$P = Q^2\frac{ba}{2} \qquad Q \gg k \qquad Qb \ll 1$$

$$\frac{P}{Ra}\left(\sin Ra + \cos Ra\right) = \cos ka$$

(?)

$$\Psi\Big|_{a<x<a+b} = \Psi\Big|_{-b<x<0} e^{ik(a+b)}$$



Elektronen im periodischen Potential

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

Translationssymmetrie des Gitters $\tilde V(\vec r) = \tilde V(r+R)$

Gittervektor

$$\tilde V(\vec r) = \sum_{\vec G} \tilde V_{\vec G}\, e^{i\vec G\cdot\vec r}$$

$\psi(\vec r)$ Entwickeln nach ebenen Wellen

$$\psi(\vec r) = \sum_{\vec k} \underbrace{C_{\vec k}\, e^{i\vec k \vec r}}_{\psi_{\vec k}(\vec r)}$$

Menge von $C_{\vec k}$ groß, durch Zustandsdichte beschränkt

$$\sum_{\vec k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_{\vec k}\, e^{i\vec k \vec r} + \sum_{\vec k', G} C_{\vec k'}\, \tilde V_G\, e^{i(\vec k' + \vec G)\vec r} = E \sum_{\vec k} C_{\vec k}\, e^{i\vec k \vec r}$$

$$\vec k' + \vec G = \vec k$$

$$\Rightarrow \sum_{\vec k} e^{i\vec k \vec r} \Big[\overbrace{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\vec k} + \sum_{\vec G} \tilde V_G\, C_{(\vec k - \vec G)}}^{=0} \Big] = 0$$

wegen Orthogonalität von Fourierkomponenten muss die Gleichung für alle $\vec r$ und $\vec k$ unabhängig gelten

$\Rightarrow$ Satz algebraischer Gleichungen für $C_{\vec k}$

$$\psi_{\vec k}(\vec r) = \sum_{\vec G} C_{\vec k - \vec G}\, e^{i(\vec k - \vec G)\vec r} = \underbrace{e^{i\vec k \vec r}}_{\text{ebene Welle}} \underbrace{\sum_{\vec G} C_{\vec k - \vec G}\, e^{-i\vec G \vec r}}_{\text{Fourier-Entwicklung einer Gitterperiod. Funktion } = u_{\vec k}(\vec r)}$$

je nach Komplexität des Potentials reichen einige Koeffizienten für gute Näherungen

Bloch-Funktion $\psi_{\vec k}(\vec r) = u_{\vec k}(\vec r)\, e^{i\vec k \vec r}$

mit Gitterperiodischer Funktion $u_{\vec k}(\vec r) = u_{\vec k}(\vec r + \underbrace{\vec R}_{\text{Gittervektor}})$

für jedes $\vec k$ kann man nun E berechnen

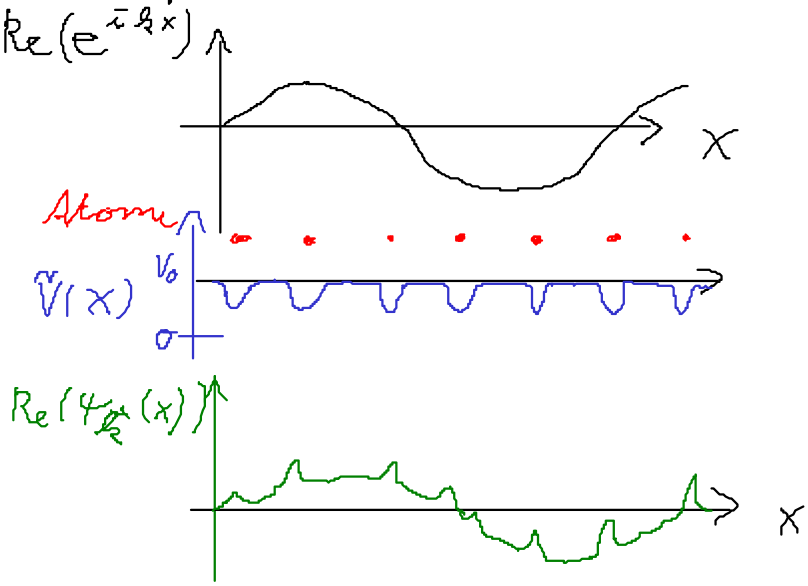
$\Leftrightarrow$ Dispersionsrelation

Translation ist gleichwertig zu Multiplikation mit

$\vec{r}\,' = \vec{r} + \vec{R} \Leftrightarrow \psi(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{R}}$

Phononen sind ebenfalls Bloch-Wellen

Beispiel



Elektron-Wellenfkt.

Potential (hier positiv gewählt)

Produkt aus $\tilde{V}$ und e^{ikx}

Reduktion auf 1. Brillouin-Zone

(reduziertes Zonen-Schema)

Die Wellenfunktionen der Elektronen und die Eigenwerte wiederholen sich periodisch im $\vec{k}$-Raum

$$\psi_{\vec{k}+\vec{G}'} = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}+\vec{G}'-\vec{G}}\, e^{i(\vec{k}+\vec{G}'-\vec{G})} = e^{i\vec{k}\vec{r}} \underbrace{\sum_{\vec{G}''} C_{\vec{k}-\vec{G}''}\, e^{-i\vec{G}''\vec{r}}}_{=\, u_{\vec{k}}(\vec{r})}$$

Umbenennen $\vec{G}'' = \vec{G} - \vec{G}'$

$$= \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$\Rightarrow$ verschieben um rez. Gittervektor ändert nichts

$$H\,\psi_{\vec{k}+\vec{G}'}(\vec{r}) = E_{\vec{k}+\vec{G}'}\,\psi_{\vec{k}+\vec{G}'}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \quad H\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}+\vec{G}'}\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \Rightarrow \quad E_{\vec{k}+\vec{G}'} = E_{\vec{k}}$$

Hauptgleichung für El. im period. Potential

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_k \sum_G \tilde{V}_G \, C_{k-G} = 0$$

Koeffizientendeterminante $\det(\cdot) = 0$

Näherung: $\tilde{V}(x) = \tilde{V}_{-\vec{g}} \, e^{-igx} + \tilde{V}_g \, e^{igx} = 2\tilde{V}_g \cos(gx)$

$g = \frac{2\pi}{a}$

Schreibweise

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \lambda_k$$

$$\begin{vmatrix} & & \cdots & & & \\ \lambda_{k-2g} - E & V_g & 0 & 0 & 0 & \\ V_g & \lambda_{k-g} - E & V_g & 0 & 0 & \\ \vdots \;\; 0 & V_g & \lambda_k - E & V_g & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & V_g & \lambda_{k+g} - E & V_g & \\ 0 & 0 & 0 & V_g & \lambda_{k+2g} - E & \\ & & \cdots & & & \end{vmatrix} = 0$$

5×5 Ausschnitt der ∞-großen Matrix

für jedes $\vec{k}$ gibt es n Lösungen

$E_n = E_{n,k} \Rightarrow n$ Energiebänder

Zwei-Komponenten-Näherung (nur C_k und C_{k-g})

$$\left.\begin{aligned} (\lambda_k - E) C_k + \tilde{V}_g \, C_{k-g} &= 0 \\ (\lambda_{k-g} - E) C_{k-g} + \tilde{V}_{-g} \, C_k &= 0 \end{aligned}\right\}$$

$$E_\pm = \frac{1}{2}(\lambda_{k-g} - \lambda_k) \pm \sqrt{\frac{(\lambda_{k-g} - \lambda_k)^2}{4} + \tilde{V}_g^{\,2}}$$

bei $k = \frac{g}{2}$ gilt $\lambda_{k-g} = \lambda_k$

$$\Rightarrow \quad E_\pm = E_{\frac{g}{2}} \pm |\tilde{V}_g| \qquad \Rightarrow \quad E_+ - E_- = \Delta E = 2|\tilde{V}_g|$$