

b) Näherung für schwach gebundene Elektronen

(i) Leeres Gitter:

Amplitude des periodischen Potentials so klein, daß $\tilde{V}_0 = 0$ gilt:

$$E_{\vec{k}} = E_{\vec{k} + \vec{G}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2$$

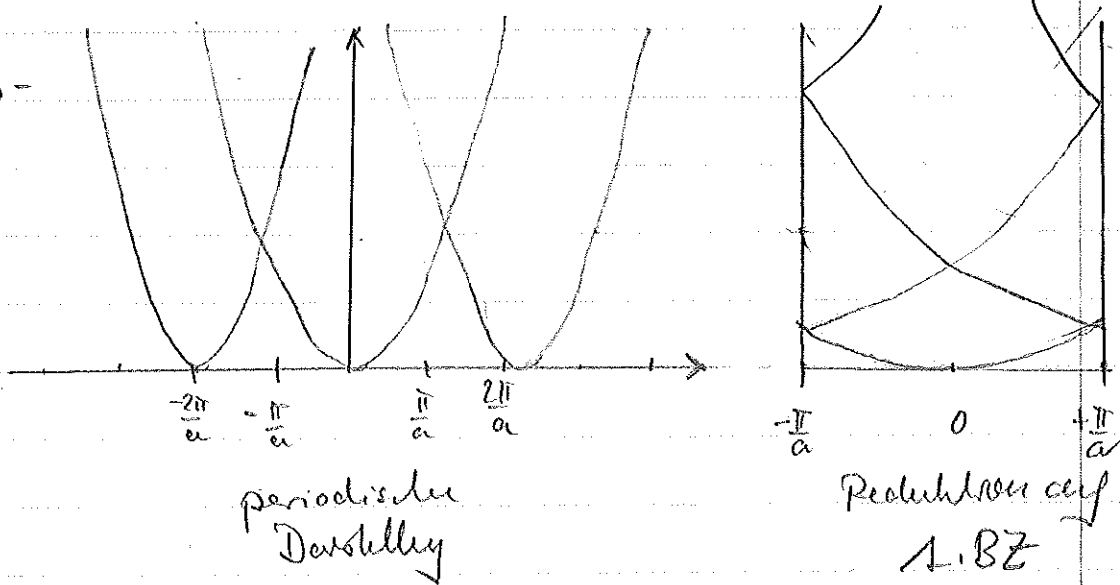
→ Dispersionskurven sind Parabeln im k -Raum, die um \vec{G} verschoben sind.

Für 1-dim. „leeres“ Gitter mit Gitterkonst. a :

(→ kleinste reziproker Gittervektor $g = \frac{2\pi}{a}$)

Fig. 4.8

Dispersionskurven



Wie man durch Reduktion auf die 1. BZ sieht:

Verschiedene Energiewerte $E_{\vec{k}}$ gehören zum gleichen Wellenvektor \vec{k}

Im 3 Dimensionen sind die Energie-dispersionskurven „für Elektronen in einem leeren Gitter“ weitläufig komplizierter. Insbesondere kommt es bei realen Kristallen zu Energie-lücken zwischen den „Zweigen“. Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird führt die Berücksichtigung des endlichen periodischen Potentials zum Auftreten der Energie-lücken.

(ii) "Schwaches" periodisches Gitterpotential (lineare Kette) 1-dimensional

Um die Energielücken zu verstehen betrachtet man die Elektronenbewegung an den Atomen des Gitters.

Bei 1-dim. Kette erfährt Elektron an jedem Atom Streuung. Erfüllt der Wellenvektor k' des Elektrons die Streubedinggung $\vec{K} = (\vec{k} - \vec{k}') = \vec{G}$

so erfährt das Elektron "Bragg-Reflexion". Der die reflektierte Welle in entgegengesetzter Richtung läuft, gilt: $k' = -k$ und damit $\vec{K} = 2k$, d.h. Bragg-Reflexion tritt beim Wellenvektor

$$|\vec{K}| = \pm \frac{g}{2} = \pm \frac{\pi}{a}$$

auf, d.h. für Wellenvektoren auf der Grenzfläche der 1.BZ tritt Reflexion auf: Überlagerung von ein/auslaufender Welle

→ stehende Welle:

$$\begin{array}{l}
\text{2 Möglichk.} \\
\text{heiten}
\end{array}
\left\{
\begin{array}{l}
\psi_s \sim e^{i g/2 x} + e^{-i g/2 x} \sim \cos\left(\frac{g x}{2}\right) \rightarrow \text{erhöhte e. dichte} \\
\psi_a \sim e^{i g x} - e^{-i g/2 x} \sim \sin\left(\frac{g x}{2}\right) \dots \dots \dots
\end{array}
\right.$$

Im Gegensatz zur räumlich konst. Ladungsdichte einer laufenden Welle ist bei ψ_s / ψ_a die Elektronendichte in Kernnähe erhöht/erniedrigt. Das führt zu einer Absenkung/Anhebung der Elektronenenergie. Bred. Fig. 4.9

Die Schrödungsgl. besitzt also an Zonegrenze 2 Lsg mit unterschiedl. des Energi \rightarrow Erklärt die Energielücke \Rightarrow Es, Ea s. S. 4-17 Fig. 4.10:

In 1-dim. "breiten Gitter" schneiden sich 2 Dispersionsparabeln bei $k_x = g/2 = \pi/a$ so daß die 2 entartete Lsg zu einem Koeff. c_k und c_{k-g} gehören. Ist die periodische Störung schwach so sollte der Hauptbeitrag zur Wellenfkt ebenfalls von diesen Lsg stammen (Beiträge von BZ höherer Ordnung sollten keine wesentliche Rolle spielen).

2-Komponenten Näherung:

Zwei Schrödingl. (***) (Hauptgl. der Bandstruktur) tragen nur 2 Komponenten c_k und c_{k-g} bei:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \tilde{V}_g c_{k-g} = 0$$

$$\left(\frac{\hbar^2 (k-g)^2}{2m} - E \right) c_{k-g} + \tilde{V}_g c_k = 0$$

(aufgrund der Inversionsymmetrie des Gitters: $\tilde{V}_g = -\tilde{V}_{-g}$)

Daraus erhält man die beiden entgegengesetzten Energieeigenwerte:

$$E_{s,a} = \frac{1}{2} \left(E_{k-g}^0 + E_k^0 \right) \mp \sqrt{\frac{1}{4} \left(E_{k-g}^0 - E_k^0 \right)^2 + \tilde{V}_g^2}$$

$s = -$ $a = +$

wobei $E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und $E_{k-g}^0 = \frac{\hbar^2 (k-g)^2}{2m}$ die Eigenwerte des freien Gitters sind.

Da bei $k = \frac{g}{2}$ gilt: $E_{k-g}^0 = E_k^0$ vereinfacht sich der Ausdruck an der Zonengrenze zu:

$$E_{s,a} = E_k^0 \pm |\tilde{V}_g| \quad \text{mit } E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

bzw $E_a - E_s = \Delta E = 2|\tilde{V}_g|$

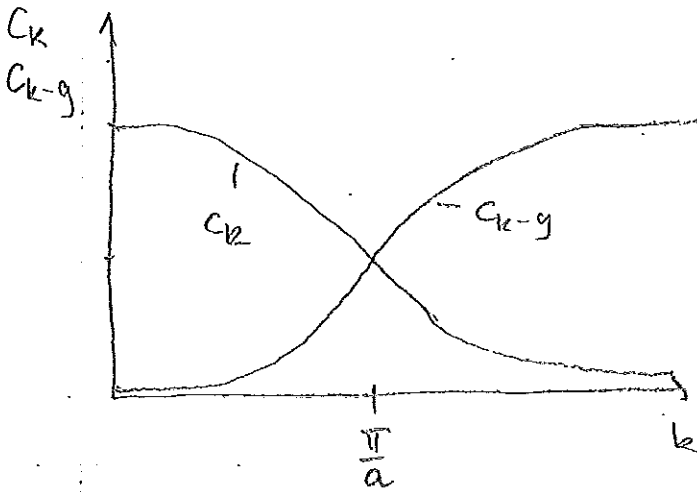
Die Energienspaltung wird also durch die erste Fourier-Komponente des Potentials $\tilde{V}(r)$ gegeben.

Die Wellenfkt für die beiden Energiebänder:

$$\psi = c_k \exp(i\vec{k}\vec{r}) + c_{k-g} \exp(i(\vec{k}-\vec{g})\vec{r})$$

unterscheiden sich nahe der Zonengrenze durch den k -Abt. Verlauf der Koeffizienten c_k und c_{k-g} den man

aus der 2-Komponenten Näherung bestimmen kann:



$$\frac{c_{k-g}}{c_k} = \frac{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{\tilde{V}_g}$$

$$\left. \frac{c_{k-g}}{c_k} \right|_{g/2} = \frac{E_k^0 \pm |\tilde{V}_g| - E_k^0}{\tilde{V}_g} = \pm 1$$

Die Koeffizienten tauschen
gegenüber ihre Rolle.

d.h. je nach E-Ergauert E_k^0
erhält man die symmetri./antisymmetri.

Für die Energieeigenfunktionen E_k eines periodischen Gitters mit
schwachem Potential ergibt sich je nach Darstellung der
folgende Verlauf: \rightarrow Fig 4.11 (Hunkeler S. 293)

- erweitertes Zonenschema
- reduziertes Zonenschema
- periodisches Zonenschema

Die Periodizität des Potentials führt also zu einer
Ergänzliche Zonen des erlaubten Energiebereichs,
Die hier durchgeführte Behandlung ist geeignet für
Metalle.

Die Behandlung von Isolatoren greift auf das
Modell "stark gebundener" Elektronen zurück.

c) Bewegungsgl. des Elektrons und effektive Masse

Bisher wurden Elektronen als "ausgestreute" Wellen behandelt. Inwieweit lassen sich aber auch klassische Gleichungen der Pkt-Mechanik auf die Elektronen im FK anwenden?

(i) Elektronen als Wellenpaket:

Angrund der Heisenberg'schen Unschärferelation können Orts- und Wellenvektor des Elektrons nicht gleichzeitig exakt bekannt sein.

Eine "bestmögliche" Lokalisierung des Elektrons erreicht man mit einer Überlagerung von Wellen mit unterschiedl.

Wellenvektoren. Freie Elektronen lassen sich durch die Überlagerung von ebenen Wellen als Wellenpaket darstellen:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum g(\vec{k}) \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot t))$$

(Die entsprechende Wahl des Ensembleskoeff. $g(\vec{k})$ aus einem engen Intervall Δk führt zu einer Lokalisierung)

Im FK treten statt der ebenen Wellen Blochwellen auf
 → die entsprechenden entsprechenden Wellenpakete erlauben eine einfache semi-klassische Beschreibung

Da Wellenvektor (relativ) gut definiert sein sollte muß "Ausdehnung" im k -Raum klein als die 1. BZ sein → räumliche Ausdehnung Δx des Wellenpakets $>$ Gitterkonstante a .
 Damit semi-klass. Beschreibung sinnvoll ist, muß ein äußeres Störfeld (z.B. \vec{E} Feld) eine Wellenlänge $\lambda \gg \Delta x$ haben.

Unter diesen Voraussetzungen:

Die Gruppengeschwindigkeit mit der sich der Schwerpunkt des Wellenpakets bei Anlegen eines äußeren \vec{E}/\vec{B} Feldes bewegt ergibt sich durch aus der Dispersionsrelation $E_n(\vec{k})$ des Energiebandes n :

$$(*) \quad \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_n(k)}{dk} \quad (1\text{-dim.})$$

Bezeichnet abh.
Gruppengeschw.

Bem: Für freie Elektronen und eine parabolformige Dispersion $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ folgt die Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{\hbar k}{m}$.

Wirkt auf ein Elektron ein äußere Kraft \vec{F} so ändert sich sein Wellenvektor \vec{k} und damit sein Quasiimpuls $\hbar\vec{k}$.

$$(**) \quad \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F} = -e \left(\vec{E}_{el} + \vec{v}_n(\vec{k}) \times \vec{B} \right)$$

Die Herleitung dieser „semi-klassischen“ Bewegung gl.

für den Fall, daß die Elektronen, mit dem periodischen Kristallgitter wechselwirken ist aufwändig.

Wie auch bei den Bloch-Funktionen ist auch bei der Wellenvektor bis auf reziproken Gittervektor \vec{G} gegeben, Deshalb bezeichnet man $\hbar\vec{k}$ als Quasiimpuls.

Aus Gl. (*) und (**) folgt für die Gruppengeschwindigkeit (Bandindex n wird im folgenden weggelassen: Felder sollen nicht ausreichen für Band-Übergänge auszuregen):

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) \cdot \hbar \vec{k} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_i} \cdot \vec{F} \end{aligned}$$

Bzw. für 1-dim Fall:

$$\ddot{v} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2} \cdot F = \frac{1}{m^*} \cdot F$$

mit effektiver Masse $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2}$

Bei im allg. 3-dim Fall ist die effektive Masse im skalar
Sinn ein Rottup abh. Tensor: $\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j}$

Benutzt man m^* führt man die Bewegungsgl.

der klass. Mechanik:
$$\begin{cases} m^* \ddot{v} = F \\ \text{bzw} \\ m^* \dot{v} = \vec{F} \end{cases}$$

Bei m^* spricht man von einer dynamischen Masse:
Die Kenntnis der Energielücke ist ausreichend
um die Bewegung des Elektrons im Kristall zu
beschreiben.

Bei allen "dynamischen" Berechnungen für Elektronen im FK
wird statt der tatsächlichen Masse die effektive
Masse benutzt, die sich stark voneinander
abwenden können.