

# Das Bloch'sche Theorem (Fortsetzung)

## Bemerkungen

(i) Kristallelektronen ("Bloch-Elektronen")  
werden durch gitterperiodische modulierte ebene Wellen dargestellt

$$\text{Für } V \equiv 0 : \quad \psi(\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}\underline{r}} \quad , \quad \underline{k} \text{ Impulseigenwert} \\ [\hat{p}, \hat{H}] = 0$$

$$\text{Für } V \neq 0 : \quad [\hat{p}, \hat{H}] \neq 0 \Rightarrow \psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}} u_{n\underline{k}}(\underline{r}) \\ \text{sind } \underline{\text{line}} \text{ Impulseigenzustände}$$

$\underline{k}$  : Kristallimpuls (crystal momentum  
quasi-momentum)

$$\underline{k} \neq \langle \hat{p} \rangle$$

(ii)  $\psi_{n\underline{k}}(\underline{r})$  ist periodisch bzgl.  $\underline{k}$  auf reziprokem Gitter

$$\underline{T}_R \psi_{n, \underline{k} + \underline{G}} = e^{i(\underline{k} + \underline{G})\underline{R}} \psi_{n, \underline{k} + \underline{G}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{R}} \psi_{n, \underline{k} + \underline{G}}(\underline{r}) \\ \uparrow \\ (e^{i\underline{G}\underline{R}} = 1)$$

d.h.  $\psi_{n, \underline{k} + \underline{G}}$  ist Eigenfunktion von  $\underline{T}_R$  zum selben Eigenwert  $e^{i\underline{k}\underline{R}}$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{n, \underline{k} + \underline{G}} = \psi_{n, \underline{k}}} \quad (\text{alle } \underline{k} + \underline{G} \text{ sind äquivalent zu } \underline{k})$$

→ Beschränkung auf 1. Brillouin-Zone

(iii) Energie - Eigenwert  $E_n(\underline{k})$  ist period. bzgl.  $\underline{k}$

$$E_n(\underline{k} + \underline{G}) = E_n(\underline{k})$$

Für festes  $\underline{k}$  gibt  $E_n(\underline{k})$  ein diskretes Spektrum ( $n=1,2,3\dots$ )

Für festes  $n$  ist  $E_n(\underline{k})$  stetig und diff. bar (außer in  
Entartungspunkten) in  $\underline{k}$

$n$ : Bandindex

$\underline{k}$ : Bloch Vektor

Bandindex  $n$ :

$$\psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}} u_{n\underline{k}}(\underline{r}) \quad \text{eingesetzt in } \boxed{H \psi_{n\underline{k}} = E_n(\underline{k}) \psi_{n\underline{k}}}$$

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

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

$$\stackrel{!}{=} E_n(\underline{k}) e^{i\underline{k}\underline{r}} u_{n\underline{k}}$$

d.h.

$$H(\underline{k}) u_{n\underline{k}} = E_n(\underline{k}) u_{n\underline{k}}$$

ist Eigenwertgleichung für  $u_{n\underline{k}}$   
 ( $\underline{k}$  fest) zu Randbedingungen

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

Hermitescher Hom. Op. (wegen zykl. RB)  
 auf endlichem Grundgebiet

→ diskretes Energiespektrum

### Entwicklung um festes $\underline{k}$

Störungstheoretische Entwicklung um  $\underline{k}$  für kleine  $\underline{\kappa}$ :

$$(1) E_n(\underline{k} + \underline{\kappa}) = E_n(\underline{k}) + \underline{\kappa} \cdot \underline{\nabla}_{\underline{k}} E_n(\underline{k}) + \frac{1}{2} \sum_{ij=1}^3 \kappa_i \kappa_j \frac{\partial^2 E_n(\underline{k})}{\partial k_i \partial k_j} + O(\kappa^3)$$

Andererseits gilt exakt

$$\begin{aligned} H(\underline{k} + \underline{\kappa}) u_{n, \underline{k} + \underline{\kappa}} &= \left[ \frac{1}{2m} (\hat{p} + \hbar \underline{k} + \hbar \underline{\kappa})^2 + V(\underline{r}) \right] u_{n, \underline{k} + \underline{\kappa}} \\ &= \left[ \underbrace{H(\underline{k})}_{H^0} + \underbrace{\frac{1}{m} \hbar \underline{\kappa} (\hat{p} + \hbar \underline{k})}_{H^1} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\kappa}^2}_{H^2} \right] u_{n, \underline{k} + \underline{\kappa}} \\ &= E_n(\underline{k} + \underline{\kappa}) u_{n, \underline{k} + \underline{\kappa}} \end{aligned}$$

nichtentartete qm. Störungstheorie

$$H = H^0 + H^1 + H^2$$

$$H^0 u_{n\underline{k}} = E_n(\underline{k}) u_{n\underline{k}}$$

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

mit  $H_{nn'}^1 := \langle u_{n\underline{k}} | H^1 | u_{n'\underline{k}} \rangle$

$$= \frac{\hbar \underline{R}}{m} \int d^3r u_{n\underline{k}}^*(\underline{r} + \hbar \underline{k}) u_{n'\underline{k}}$$

$$= \underline{R} \frac{\hbar}{m} \underbrace{\int d^3r \psi_{n\underline{k}}^* \hat{p} \psi_{n'\underline{k}}}_{P_{nn'}}$$

Koeffizientenvergleich von (1) & (2) bezgl.  $\underline{R}$

$O(\underline{R})$ :  $\nabla_{\underline{k}} E_n(\underline{k}) = \frac{\hbar}{m} \langle \hat{p} \rangle$   $\langle \hat{p} \rangle = P_{nn}$

Gruppengeschwindigkeit =  $\langle$  Geschwindigkeits. Op  $\rangle$   

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

$O(\underline{R}^2)$ : 
$$\frac{1}{2} \sum_{ij} k_i k_j \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{1}{m^2} \sum_{n'} \frac{P_{nn'}^i P_{n'n}^i + P_{nn'}^j P_{n'n}^j}{E_n(\underline{k}) - E_{n'}(\underline{k})} k_i k_j$$

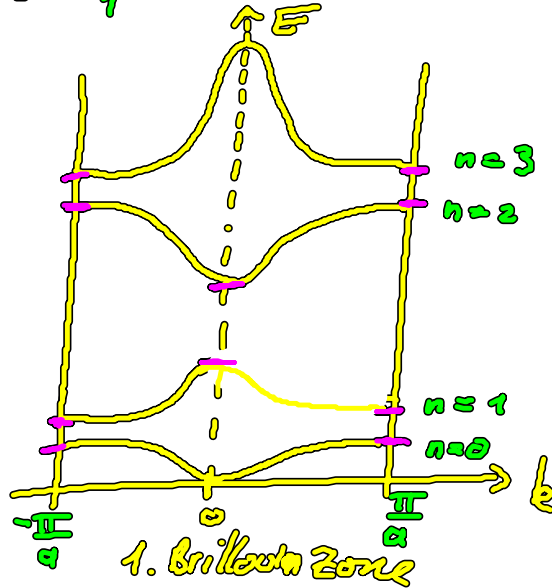
$\uparrow$   $H_{nn}^2$   $\uparrow$   $\sum_{n' \neq n} \frac{|\frac{\hbar}{m} \underline{k} P_{nn'}|^2}{E_n(\underline{k}) - E_{n'}(\underline{k})}$

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

Tensor der inversen effektiven Masse  
 (bestimmt Dynamik der Kristallelektr. im el. Feld)

# (iv) Bandstruktur

$E_n(\underline{k})$  beschreibt quasikontinuierliche Energiebänder



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

Kramersches Theorem

(zeitumkehrsym., gilt auch ohne  
inversionssym.)

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

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 entartet bzgl.  $H$

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

□

(v) Kristallelektronen sind Quasiteilchen, die WW mit dem starren Gitter bereits enthalten:

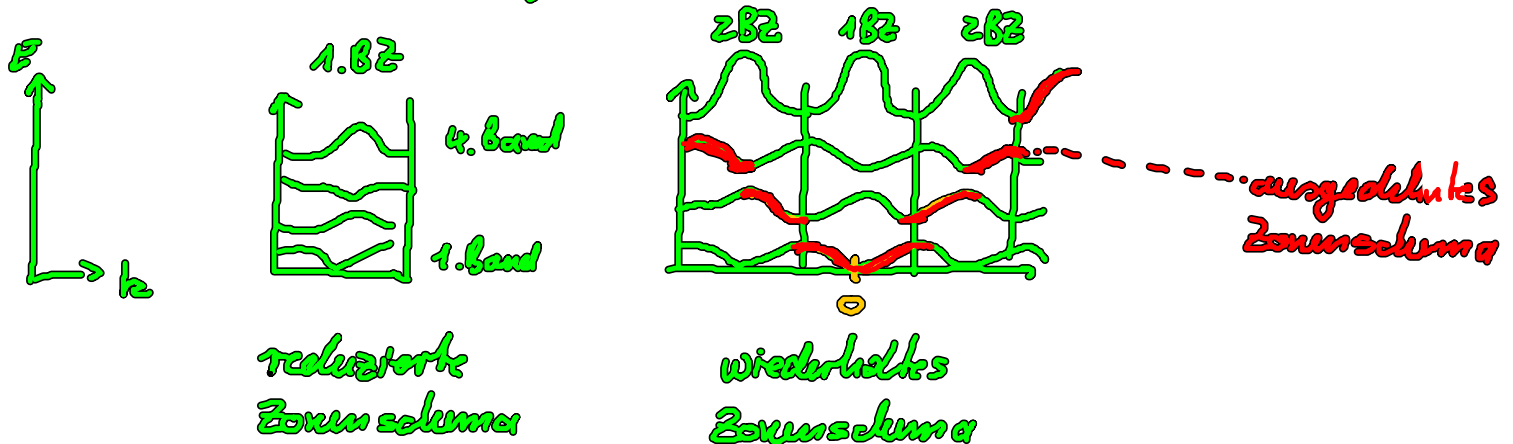
	freie Elektronen	Kristallelektronen
Wellenfkt	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$	$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Bloch fkt.
Energieeigenwert	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$E_n(\mathbf{k})$ Bandstruktur
Impuls $\langle p \rangle$	$\hbar \mathbf{k}$	$\frac{m}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k})$
$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$	$\frac{1}{m} \delta_{ij}$	Tensor der inv. eff. Masse

## 4.2 Näherung für fast freie Elektronen

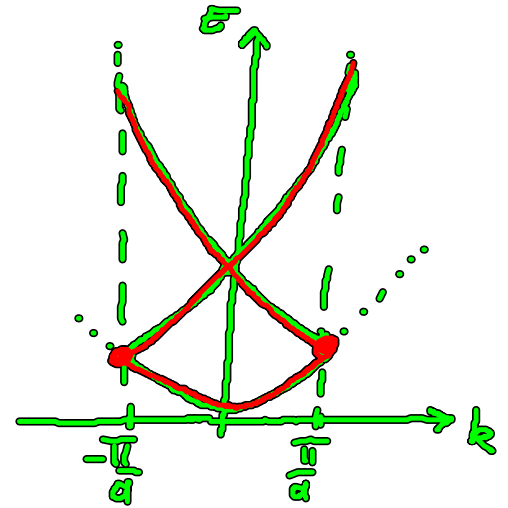
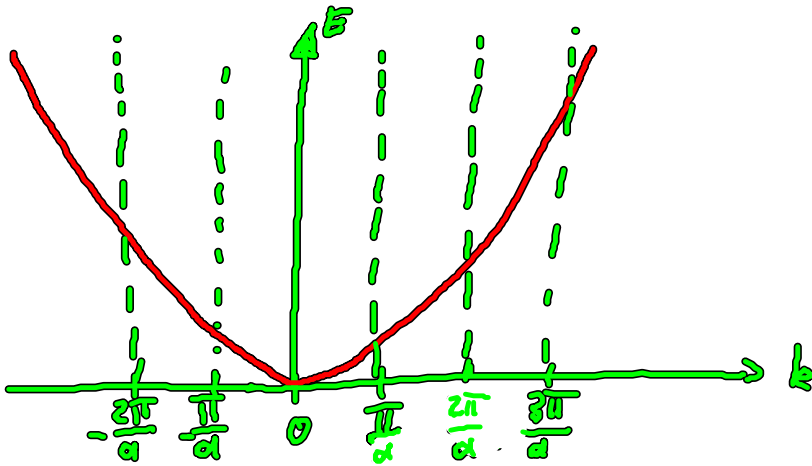
Freie Elektronen ( $V=0$ ):

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

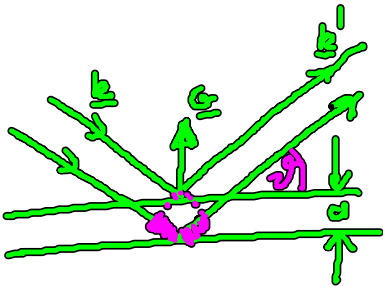
• Verschiedene Darstellungen der Bandstruktur:



# Darstellung im ausgedehnten Zonenplan



## Bragg - Reflexion



Netzvektor

$$2a = n\lambda \quad n \in \mathbb{N}$$

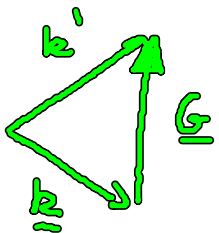
(schr. Einfall)

$$\text{allg. } 2a \sin \varphi = n\lambda$$

$$\sin \varphi = \frac{-Gk}{Gk}$$

$$\Leftrightarrow 2a \underline{G} \underline{k} + Gk n \lambda = 0$$

$$\Leftrightarrow 2\underline{G} \underline{k} + \underbrace{G \frac{k n \lambda}{a}}_{G = 2\pi \frac{n}{a}} = 0$$



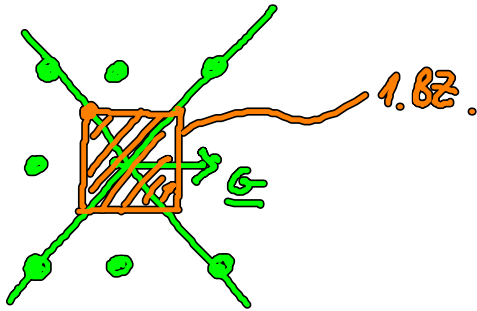
$$\underline{k}' = \underline{k} + \underline{G}$$

$$\underline{k}^2 = (\underline{k} + \underline{G})^2$$

Bedingung  
für Bragg Reflexion

d.h. Elektronenwellen mit  $k^2 = (k+G)^2$  können sich im Kristall nicht ausbreiten, da sie reflektiert werden.

Diese Bedingung legt gerade den Rand der Brillouinzone fest.



$\underline{k} \cdot \underline{G} = -\frac{1}{2} G^2$  beschreibt Ebene  $\perp$  zum Mittelpunkt der Verbindungsstrahlen zwischen zwei Gitterpunkten

## Bandstruktur des freien Elektronengases

- Entartung auf dem Rand der BZ durch Schnittpunkt zweier Energieparabel

- Schwaches Gitterpotenzial  $V(r)$ :

Störungsrechnung in der Nähe der Entartungspunkte

→ Aufhebung der Entartung