Übungen zur Festkörperphysik I

Lösungen zu Serie 7

1 Die Fermifläche

Man berechne den Radius der Fermikugel in 2D:

$$k_F = (2\pi n)^{\frac{1}{2}} = (2\pi \frac{3}{2\pi^2})^{\frac{1}{2}} \text{Å} = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \text{Å}$$

Die Abbildung 1 zeigt das reziproke Gitter mit der Fermikugel und der ersten bzw. zweiten Brillouinzone. Die schraffierten Bereiche auf der rechten Seite zeigt die Fermikugel in der ersten und in der zweiten Brillouinzone.

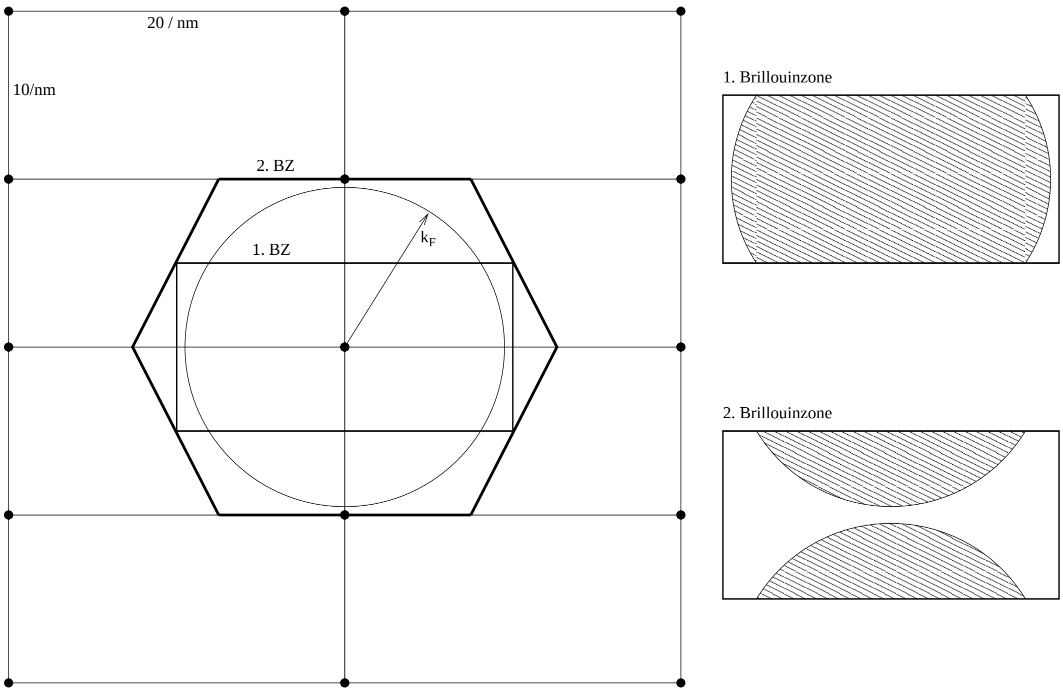


Abbildung 1: Fermifläche eines Elektronengases in 2 D mit 3 Elektronen pro Gitterplatz (Gitter: 2πÅ$\times\pi$Å).

2 Näherung für fast freie Elektronen

a) Die qualitative k-Abhängigkeit von E, v_G und $m^\star/m$ für das erste und zweite Energieband in der Näherung eines schwachen Potentials ist für den 1-dim. Fall in der

Abbildung auf der letzten Seite qualitativ dargestellt.

$$v_G = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k} \tag{1}$$

$$\frac{m^\star}{m} = \frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)^{-1} \tag{2}$$

Wie die Skizzen zeigen, verhalten sich v_G und $m^\star/m$ bei $k = 0$ verschieden für das 1. und 2. Band. Das ist nur in der Näherung eines schwachen Potentials so, wo der Zustand $k = 0$ für das 1. Band den ungestörten Zustand freier Elektronen darstellt und die Krümmung an diesem Punkt nicht durch das periodische Potential bestimmt ist.

b) In der Nähe des Brillouin-Zonenrandes ist die Bragg'sche Bedingung fast genau erfüllt. Es gibt also eine starke Reflektion $k \Rightarrow k' = k - 2\frac{\pi}{a}$, wobei die zwei Zustände Ψ_k und $\Psi_{k'}$ fast entartet sind. Gesucht ist die Wellenfunktion Ψ, welche die Schrödingergleichung

$$(H^{(0)} + V)\Psi = E\Psi$$

erfüllt. Eine gute Näherung für Ψ ist:

$$\begin{aligned}
\Psi &= C_k\Psi_k + C_{k'}\Psi_{k'} \\
H^{(0)}\Psi_k &= \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)\Psi_k = E_k^{(0)}\Psi_k \\
H^{(0)}\Psi_{k'} &= \left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right)\Psi_{k'} = E_{k'}^{(0)}\Psi_{k'}
\end{aligned}$$

Um die Eigenwerte des Operators $(H^{(0)}+V)$ zu finden, schreibt man die Schrödinger-Gleichung in Matrizenform:

$$\left\{\begin{pmatrix} E_k^{(0)} & 0 \\ 0 & E_{k'}^{(0)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_{kk} & V_{kk'} \\ V_{k'k} & V_{k'k'} \end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix} C_k \\ C_{k'} \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} C_k \\ C_{k'} \end{pmatrix}$$

mit $V_{kk'} = \int \Psi_k V \Psi_{k'}$. Man erhält damit die Sekulärgleichung

$$\det\begin{pmatrix} V_{kk} + E_k^{(0)} - E & V_{kk'} \\ V_{k'k} & V_{k'k'} + E_k'^{(0)} - E \end{pmatrix} = 0$$

mit den folgenden Lösungen:

$$\begin{aligned}
E_\pm &= \frac{1}{2}(E_k^{(0)} + V_{kk} + E_{k'}^{(0)} + V_{k'k'}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_k^{(0)} + V_{kk} - E_{k'}^{(0)} - V_{k'k'})^2 + |V_{kk'}|^2} \\
V_{kk} &= V_{k'k'} \ll E_k^{(0)} E_{k'}^{(0)} \\
\Rightarrow E_\pm &= \frac{1}{2}(E_k^{(0)} + E_{k'}^{(0)}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)})^2 + |V_{kk'}|^2}
\end{aligned}$$

In der Nähe des Brillouin-Zonenrandes findet man mit $k = \frac{\pi}{a} + \kappa$, $k' = -\frac{\pi}{a} + \kappa$, $\kappa \approx 0$ und $V_G = V_{kk'}$

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \kappa^2\right] \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2\pi}{ma}\kappa\right)^2 + |V_G|^2}$$

Man erhält

$$E_{\pm} = E_{\text{Rand}}^{\text{frei}} + E_{\kappa,\pm}$$

mit

$$E_{\text{Rand}}^{\text{frei}} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

und

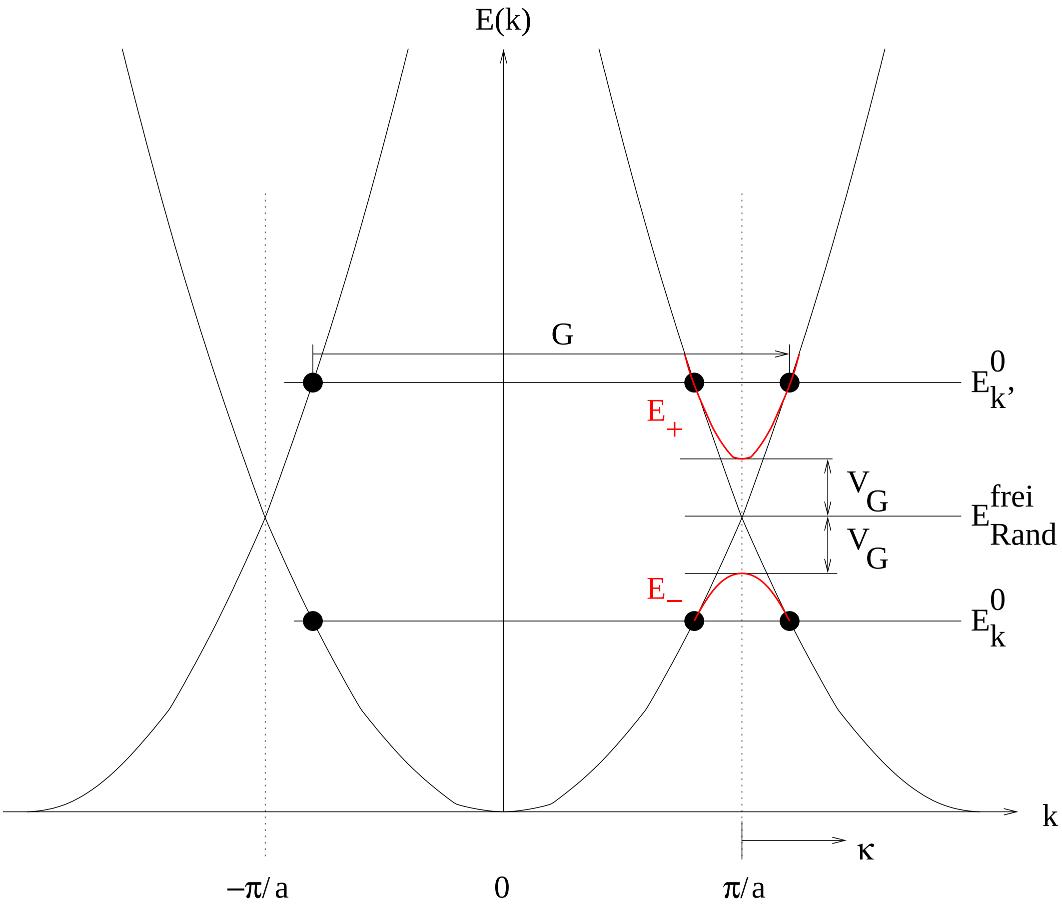
$$E_{\kappa,\pm} = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2\pi}{ma}\kappa\right)^2 + |V_G|^2}$$

c) Für sehr kleine κ-Werte kommt heraus:

$$E_{\kappa,\pm} = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 \pm |V_G|\left(1 + \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2\pi\kappa}{ma|V_G|}\right)^2\right)$$

$$E_{\pm} \approx E_{\text{Rand}}^{\text{frei}} \pm |V_G| \pm \frac{\hbar^2}{2m}\left[1 + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \frac{1}{|V_G|}\right]\kappa^2 \approx E_{\text{Rand},\pm} + \frac{\hbar^2}{2m^*}\kappa^2$$

wobei $E_{\text{Rand},\pm} = E_{\text{Rand}}^{\text{frei}} \pm |V_G|$ und $m^* = \pm m\left[1 + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \frac{1}{|V_G|}\right]^{-1}$.



3 Näherung für fast gebundene Elektronen

a) Für die kubisch flächenzentrierte Struktur sind die nächsten Nachbarn gegeben durch:

$$R_n = \pm\frac{a}{2}\{(1,1,0),(1,-1,0),(0,1,1),(0,1,-1),(1,0,1),(1,0,-1)\}$$

Damit ergibt sich für

$$\sum_{\text{n.N. } i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} = 4\{\cos(k_x\frac{a}{2})\cos(k_y\frac{a}{2}) + \cos(k_x\frac{a}{2})\cos(k_z\frac{a}{2}) + \cos(k_y\frac{a}{2})\cos(k_z\frac{a}{2})\}$$

und somit für die Energie

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta - 4\gamma\{\cos(k_x\frac{a}{2})\cos(k_y\frac{a}{2}) + \cos(k_x\frac{a}{2})\cos(k_z\frac{a}{2}) + \cos(k_y\frac{a}{2})\cos(k_z\frac{a}{2})\}$$

b) Beginnend beim Γ-Punkt

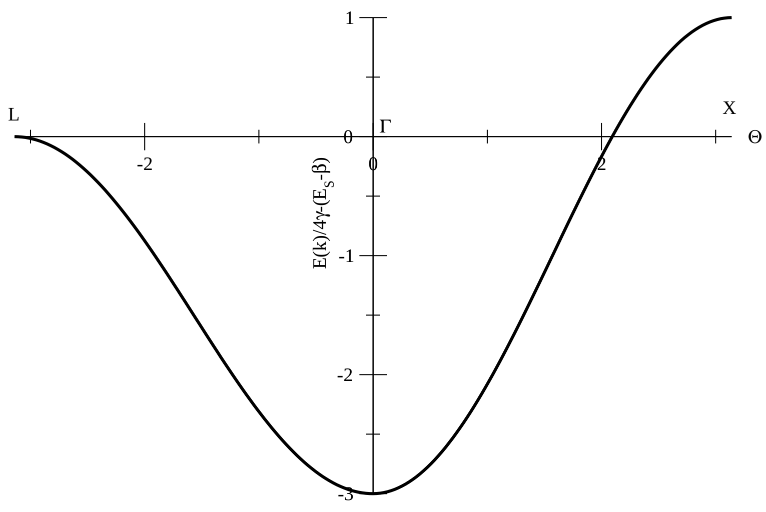
$$k = \Gamma = (0,0,0): \qquad E_\Gamma = E_s - \beta - 12\gamma$$

in Richtung X, $\vec{k} = \frac{2\Theta}{a}(1,0,0)$, $0 < \Theta < \pi$, ergibt sich

$$E_\Theta = E_s - \beta - 4\gamma(2\cos\Theta + 1)$$

und in Richtung L, $\vec{k} = \frac{\Theta}{a}(1,1,1)$, $0 < \Theta < \pi$, folgt

$$E_\Theta = E_s - \beta - 4\gamma(3\cos^2(\Theta/2))$$



c) Die Bandbreite bestimmt sich mit $D = E_{\max}(k) - E_{\min}(k)$, also

$$D = 16\gamma$$

d.h. D ist nur von γ abhängig, welches ein Mass ist für die Überlappung der Wellenfunktionen nächster Nachbarn für ein gegebenes Potential. D ist somit gross für starke Überlappung.

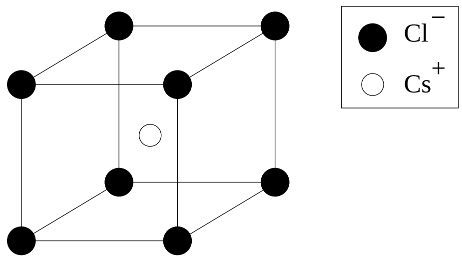
d) Aus der Aufgabenstellung entnimmt man für β:

$$\beta = -\int \Psi_s^\star(\vec{r})\delta V(\vec{r})\Psi_s(\vec{r})\mathrm{d}^3 r$$

$(\Psi_s^*\Psi_s)$ ist immer positiv. Die Veränderung des elektrostatischen Potentials am Ort des Cs^+-Ions ($R = \frac{a}{2}(1,1,1)$) verursacht durch die Cl^--Ionen ist: $8(-e/R)$. Dieses Potential wirkt auf das betrachtete Elektron (mit Ladung $-e$), d.h. die Energie δV ist grösser als Null:

$$\delta V = 8(e^2/R) > 0$$

$$\Rightarrow \beta < 0$$



Bemerkung

Es ist bemerkenswert, dass für die beiden sehr unterschiedlichen Ansätze des fast freien Elektronengases und des tight-binding-Modells qualitativ dasselbe Resultat herauskommt, nämlich die Bandstruktur der Elektronen im Festkörper. Diese kann ihrerseits Metalle, Halbleiter und Isolatoren charakterisieren und erhält somit eine gewichtige Bedeutung in der Festkörperphysik.

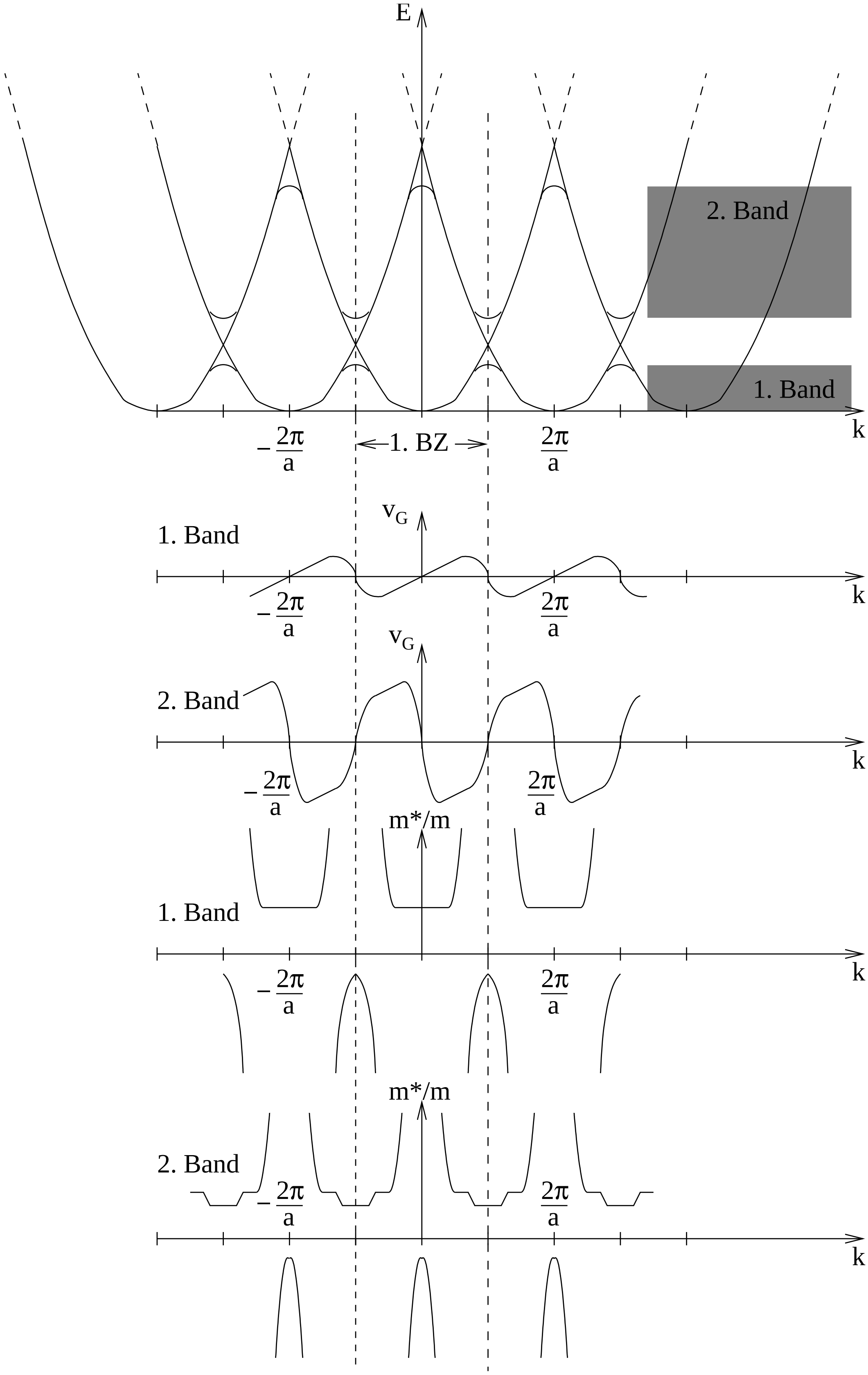


Abbildung 2: Qualitative Darstellung zu Aufgabe 2a