

Übungen zur Festkörperphysik I

Serie 7: Elektronen im periodischen Potential

Verteilung: 5.12.2006

Abgabe: 13.12.2006

Rückgabe: 20.12.2006

Kurzfragen

- Was versteht man unter elektronischer Bandstruktur ?
- Was sagt die Breite der elektronischen Bänder aus?
- Wie kommen Energielücken am Brillouin-Zonenrand zustande?
- Wie hängen die elektrischen Leitungseigenschaften eines Materials mit dessen Bandstruktur zusammen?

1 Fermifläche

Zeichnen Sie die Fermifläche im reduzierten Zonenschema für ein rechteckiges Gitter mit einem Atom pro Gitterplatz, welches 3 Elektronen an das Leitungsband abgibt. Die Dimension der Einheitszelle im direkten Raum ist $2\pi\text{\AA} \times \pi\text{\AA}$. Für die Zeichnung im reziproken Raum wähle z.B. 2 cm pro \AA^{-1} .

2 Näherung für fast freie Elektronen

Wir wollen ein freies Elektronengas einem periodischen Potential aussetzen. Wir wählen dazu ein einfaches Modell: Wir betrachten 1 Elektron in 1 Dimension und nehmen ein schwaches periodisches Potential $V(x) = V(x+a)$ an, so dass wir das Problem mit den Methoden der Störungsrechnung angehen können.

- Dispersionsbeziehung, Gruppengeschwindigkeit und effektive Masse: Zeichne qualitativ (3 Skizzen untereinander) die k -Abhängigkeit von E , v_G und $\frac{m^*}{m}$ für das erste und zweite Energieband mit den oben genannten Annahmen (schwaches Potential, 1 Dimension)
- Zeige, dass in der Nähe des Brillouinzonenrandes die Dispersionsrelation für ein Elektron folgende Form annimmt:

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

wobei

$$k = \pm \frac{\pi}{a} + \kappa,$$

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

und

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

mit $G = \frac{2\pi}{a}$

c) Zeige, dass für kleine κ -Werte gilt:

$$E_{\pm} = E_{\text{Rand},\pm} + \frac{\hbar^2}{2m_{\pm}^*} \kappa^2$$

mit $E_{\text{Rand},\pm} = E_{\text{Rand}}^{\text{frei}} \pm |V_G|$.

3 Näherung für fast gebundene Elektronen

Die Näherung des tight-binding-Modells erlaubt bei starker Kopplung s-Bänder auf eine recht einfache Art zu berechnen. Dabei wird von der Wellenfunktion der freien Atome ausgegangen und die Wechselwirkung mit dem Kristall als Störung aufgefasst. Für die Rechnung wird nur die Wechselwirkung mit den nächsten Nachbarn berücksichtigt. Die Energie im Band ist dann gegeben durch:

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta - \sum_{\text{n.N. } i} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} \gamma(\vec{R}_i) \quad (1)$$

wobei E_s die Energie des atomaren Grundzustandes ist, β das Kristallfeldintegral, γ das Überlappungsintegral, \vec{k} in der 1. Brillouin-Zone liegt und R_i der relative Abstand zum nächsten Nachbarn ist.

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

$$\gamma(\vec{R}) = - \int \Psi_s^*(\vec{r}) \delta V(\vec{r}) \Psi_s(\vec{r} - \vec{R}) d^3 r$$

- Bestimmen Sie ausgehend von (1) $E(\vec{k})$ für ein stark gebundenes s-Band in der kubisch-flächenzentrierten Struktur.
- Die Punkte Γ , X und L befinden sich im Zentrum, respektive am Rand der ersten Brillouin-Zone und haben die Koordinaten:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 0) \quad X = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0) \quad L = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

Zeichnen Sie $E(\vec{k})$ ausgehend von L in Richtung Γ und weiter in Richtung X.

- Welchen Wert hat die gesamte Bandbreite $D = E_{\max}(\vec{k}) - E_{\min}(\vec{k})$ für dieses Band und durch welche Faktoren wird es beeinflusst?
- Angenommen, wir wollen das s-Band von Cäsium in einem CsCl-Ionenkristall in der tight-binding Näherung beschreiben. CsCl hat eine einfach kubische Struktur mit 2-atomiger Basis: Cl bei $a(0, 0, 0)$ und Cs bei $\frac{a}{2}(1, 1, 1)$. Welches Vorzeichen hat das Kristallfeldintegral β ? Eine Zeichnung der Struktur hilft bei der Überlegung!