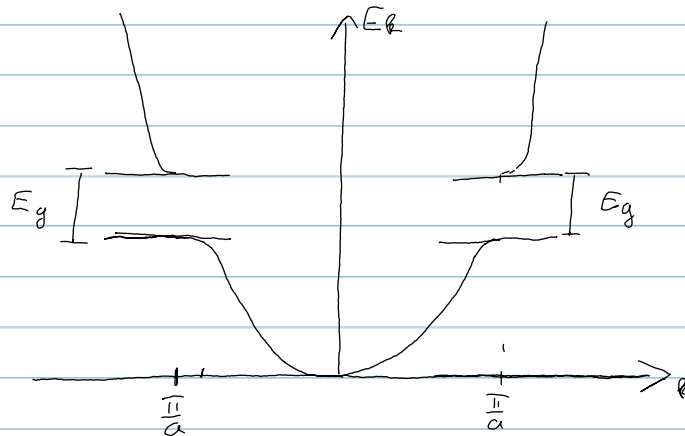


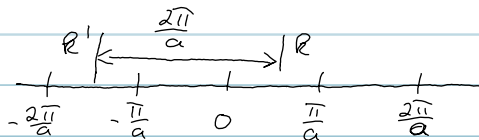
Wdh.:

30.05.12



Darstellung der Bandstruktur

betrachte k, k' : $k = k' + n \frac{2\pi}{a}$



Bloch-Theorem: $\psi_k(x+a) = e^{iRa} \psi(x)$ (\rightarrow siehe ÜB 7)

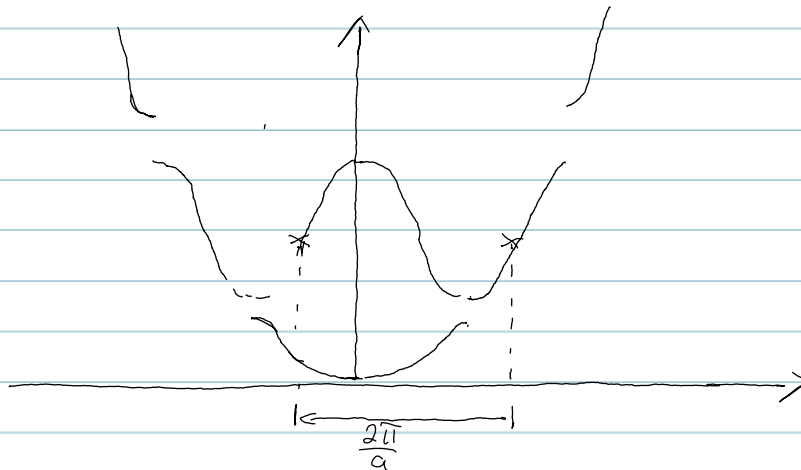
$$= e^{i(k' + n \frac{2\pi}{a})a} \psi_{k'}(x)$$

$$= e^{iR'a} e^{i2\pi n} \psi_{k'}(x)$$

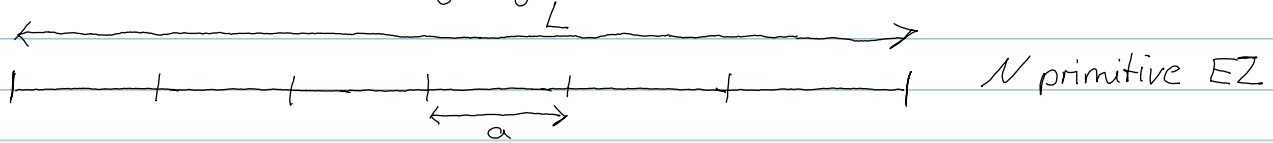
$$= e^{iR'a} \psi_{k'}(x)$$

$\hookrightarrow k, k'$ physikalisch ununterscheidbare Zustände

\hookrightarrow reduzierte Darstellung



Periodische Randbedingungen



$$L = N \cdot a$$

Anzahl Orbitale pro Band L

$$\hookrightarrow k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm n \frac{2\pi}{L}$$

Intervall $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ enthält alle physikalisch unterscheidbaren Zustände von k (BZ)

$$\pm n_{\max} \frac{2\pi}{L} = \pm \frac{\pi}{a}$$

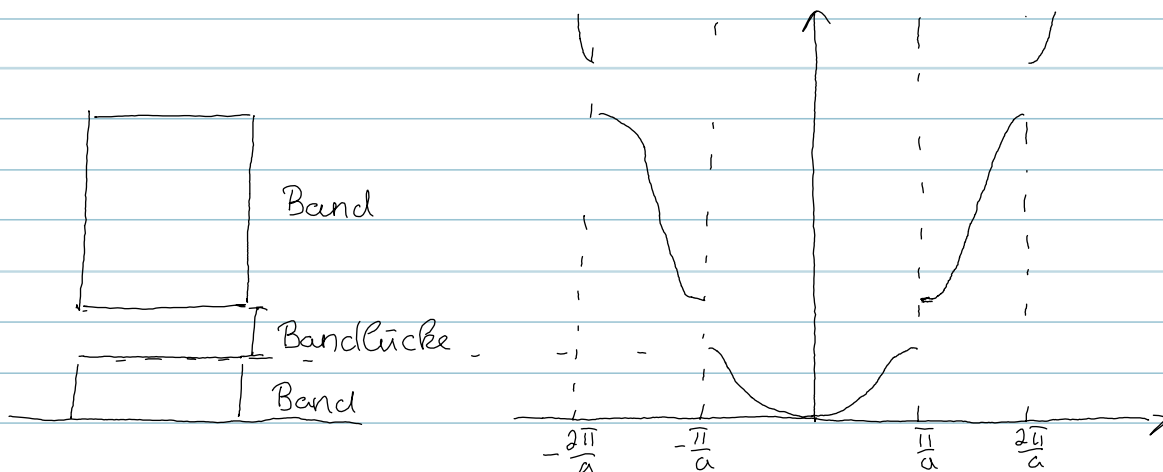
$$\pm n_{\max} = \pm \frac{L}{2a} = \pm \frac{Na}{2a} = \pm \frac{N}{2}$$

\hookrightarrow genau N physikalisch unterscheidbare Zustände
($2N$ Spinzustände)

jede EZ trägt genau 1 unabhängigen Wert von k zum Band bei

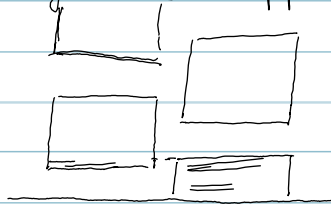
Bändermodell

- Unterscheidung Metalle, Isolatoren, Halbleitern, Halbmetallen
- Isolatoren:



- alle Bänder entweder vollständig gefüllt oder leer
- Leiter: eines oder mehrere Bänder sind teilweise gefüllt
- Metalle: höchstes besetztes Band enthält große Anzahl besetzter und freier Zustände
- Halbleiter: Valenzband ist von Leitungsband durch rel. kleine Bandlücke getrennt ($\sim 1\text{eV}$)

Halbmetalle: Grundlage: Überlappung von Bändern



Erklärung von RCT

Metalle / Halbmetalle: $T \uparrow \Rightarrow R \uparrow$: e^- -Phononen-WW

Halbleitern / Isolatoren: $T \uparrow \Rightarrow R \downarrow$: therm. Anregung überwiegt
andere Effekte
 $\sim \exp(-E_{\text{Lücke}} / kT)$

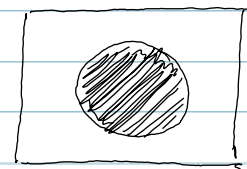
Aufbauprinzip einfacher FK

- Anzahl Zustände in Zone = Anzahl primitive EZ ($\times 2$)
- Anzahl Atome pro EZ
- Anzahl Valenz e^-
- Bandlücke oder Überlapp von Bändern

Alkalimetalle: Kubisch raumzentriert

↳ 1 Atom / EZ : 1 Valenzelektron

↳ s-Band halb gefüllt



Münzmetalle: Kubisch flächenzentriert

Cu, Ag, Au

↳ d-Band gefüllt, s-Band halb gefüllt

z.B. Cu



3. HG: Kubisch flächenzentriert

z.B. Al

↳ 1 Atom / EZ : 3 Valenz- e^-

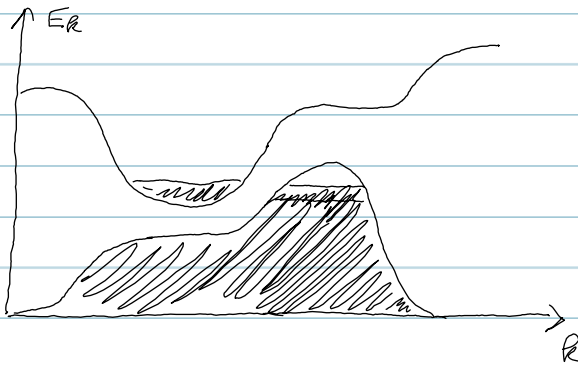
↳ $1\frac{1}{2}$ Bänder gefüllt

Erkaliummetalle: verschiedene Strukturen

↳ 1 Atom /EZ: 2 Valenz e^-

sollten Nichtmetalle sein?

aber: 2D/3D Überlapp von Bändern



4. HG: z. B. C (kubisch flächenzentriert)

↳ 2 Atome /EZ: 8 Valenz- e^-

↳ 4 Bänder gefüllt

↳ große Bandlücke: Isolator

Si, Ge, α -Sn: ähnliche Beschreibung, aber zunehmend

kleinere Bandlücke

Pb (kubisch flächenzentriert)

↳ 1 Atom /EZ: 4 Valenz e^-

↳ 2 Bänder gefüllt

Überlapp von Bändern (Halbmetall)

5. HG: As, Sb, Bi (rhomboedrisch)

↳ 2 Atome /EZ: 10 Valenz- e^-

↳ 5 Bänder gefüllt, Überlapp von Bändern (Halbmetalle)

Modell des stark gebundenen e^- (TBA, LCAO)

bisher: Fokus auf ψ zwischen Kernen

jetzt: Fokus auf ψ am Kern: $\psi \sim A_0$

Näherungen

• $V(r) \gg \bar{T}$

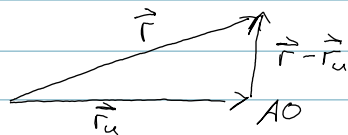
• Kernpot. über dominiert

• Nähe i -ter Kern: $\psi \sim \phi_i$; e^- durch andere Kernpot. relativ wenig beeinflusst

↳ Modell komplementär zu NVC

: Beschreibung von $d e^-$ und Valenzbändern polarer Verb.

Entstehung s-Band



N Atome

atom. Zustände $\phi(r)$

Energie E_0

ψ_{MO} wird durch Linearcomb. von $\phi(r - r_u)$ angenähert (LCAO)

$$\boxed{\psi = \sum_n c_n \phi(r - r_u)}$$
 ψ muss Bloch-Theorem genügen

$$\hookrightarrow \psi_{\mathbf{k}}: \frac{1}{N} \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n} \phi(r - r_u)$$

\mathbf{k} -Wertebereich: $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$

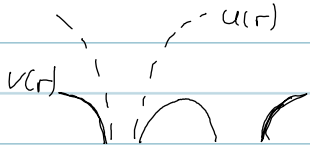
Anzahl \mathbf{k} -Werte: Anzahl Atome N ($2N$ Spinzustände)

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\int \psi_{\mathbf{k}}^* H \psi_{\mathbf{k}} d\tau}{\int \psi_{\mathbf{k}}^* \psi_{\mathbf{k}} d\tau}$$

Berechnung erheblich vereinfacht, wenn nur Überlapp nächster Nachbarn (n, m) berücksichtigt wird (TBA)

$$\hookrightarrow E_{\mathbf{k}} = E_0 - \alpha - \beta \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)}$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= - \int \psi_m^* (V-U) \psi_m d\tau \\ \beta &= - \int \psi_m^* (V-U) \psi_n d\tau \end{aligned} \right\} \alpha, \beta \text{ beschreiben Unterschied} \\ \text{zwischen Kristallpot. } V \text{ und} \\ \text{atomaren Pot. } U$$



$$\alpha, \beta > 0 \sim 100 \text{ kJ/mol}$$

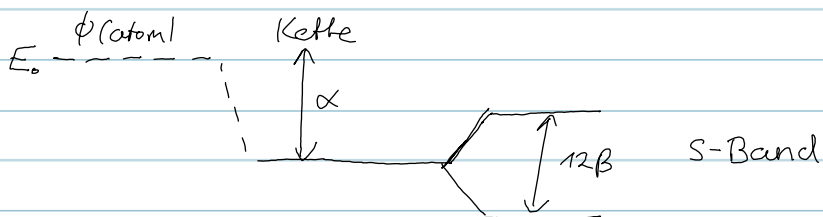
z. B. einfache kub. Struktur

Nächste Nachbarn m : $(\pm a, 0, 0)$; $(0, \pm a, 0)$; $(0, 0, \pm a)$

$$\hookrightarrow E = E_0 - \alpha - 2\beta (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

da $k_{\max} = \pm \frac{\pi}{a}$ für k_x, k_y, k_z

$$\hookrightarrow \pm 6\beta \Rightarrow \text{Bandbreite } 12\beta$$



• jeder Atomzustand (s, p, \dots) \rightarrow Band im FK

• Bandbreite (Dispersion) abh. von Struktur nimmt mit Überlapp zu