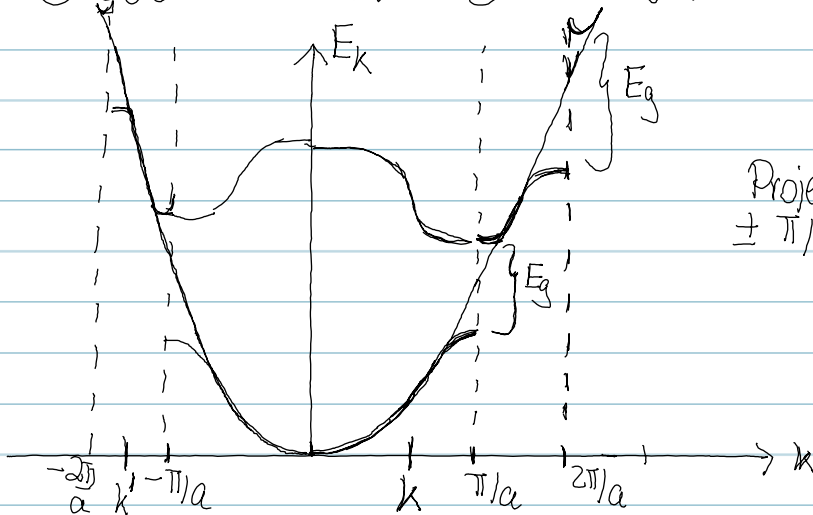


Modell nahezu freier e^- (NFE)

20.06.1.

Block: $\psi(x) = e^{ikx} \cdot u(x)$



Projektion in die Zone $\pm \pi/a$

Darstellungen

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

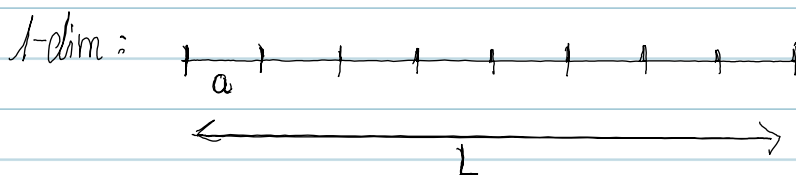
$$\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x) \quad (\rightarrow \text{ÜB 7})$$

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

$$= e^{ik'a} \underbrace{e^{i2\pi n}}_1 \psi(x) = e^{ik'a} \psi(x)$$

- ↳ keine physikalisch unterscheidbaren Zustände
- ↳ reduziertem Schema

Anzahl der Zustände (Orbitale) pro Band ?



N EZ (primär)

$$L = N \cdot a$$

→ k -Werte? $k = \pm \frac{2\pi}{L}, \dots, \pm n \frac{2\pi}{L}$

Intervall: $[-\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a}]$

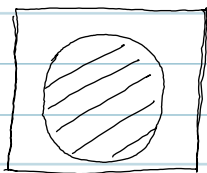
$\pm n_{\max} \frac{2\pi}{L} = \pm \frac{\pi}{a} \quad \rightarrow \quad \pm n_{\max} = \pm \frac{L}{2a} = \pm \frac{N}{2}$

→ N -Zustände (2N-Elektronen)

Aufbauprinzip eines FK:

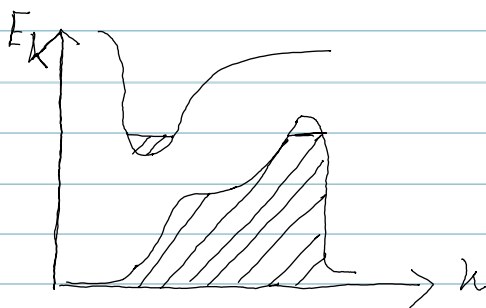
- Anzahl Zustände pro Band = Anzahl EZ
- Atome pro EZ
- Valenzelektronen pro Atom
- Bandlücke oder Überlapp von Bändern

Alkalimetalle:



Fermikreis: $\frac{1}{2}$ BZ

Erdalkalimetalle:



⇒ Überlapp von Bändern

3. Hauptgruppe: z.B. Al

4. Hauptgruppe: z.B. C 2 Atome/EZ → 8 Valenz e^- /EZ

•
•
•

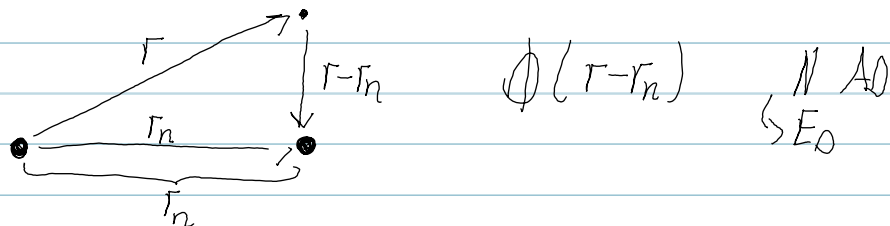
Modell stark gebundenes e^- (TBA, LCAO-MO)

komplementär zu NFE

Modell:

- $\psi \sim \phi_i$ (i-tes e^-)
- Kernpotential dominiert $V \gg E_{\text{ion}}$

Entstehung s-Band:



$$\psi = \sum_n C_n \phi(r - r_n)$$

Bloch-Theorem:

$$\psi_k = \sum_n e^{ikr_n} \phi(r - r_n)$$

1-dim: $r_n = n \cdot a$

$$\hookrightarrow \psi_k = \sum_n e^{ikna} \phi_n$$

Variationsprinzip:

$$E_k = \frac{\int \psi_k^* \hat{H} \psi_k d\tau}{\int \psi_k^* \psi_k d\tau}$$

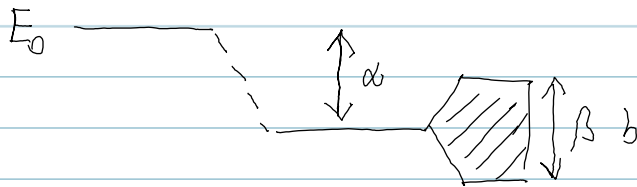
TBA: Überlapp nächster Nachbarn n, m

$$E_n = E_0 - \alpha - \beta \sum_m e^{-ik(r_n - r_m)}$$

Resonanz

Coulomb

b



z. B. einfaches kubisches Gitter

nächster Nachbar m : $(\pm a, 0, 0)$ $(0, \pm a, 0)$ $(0, 0, \pm a)$

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

wegen $k_{\max} = \pm \pi/a$

$\hookrightarrow \pm 6\beta \rightarrow$ Bandbreite 12β $\alpha, \beta > 0 \sim 100 \frac{\text{eV}}{\text{mol}}$

(\rightarrow ÜB 8)