

Bandstrukturen II: NFE-Ansatz (nearly free electron)

Quantenchemische Rechenmethoden: Grundlagen und Anwendungen



http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/Vorlesung/Seminare/m+k_bs_II.pdf

Caroline Röhr

Universität Freiburg, Institut für Anorganische und Analytische Chemie

SS 2025

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

- ▶ Lehrbücher der Festkörperphysik:
 - ▶ Ch. Kittel: Festkörperphysik, Oldenbourg, 14. Auflage, 2006.
 - ▶ R. Gross, A. Marx: Festkörperphysik, De Gruyter, 2014.
 - ▶ G. Grosso, G. P. Parravicini: Solid State Physics, Elsevier, 2014.
 - ▶ N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, D. Wei: Solid State Physics, Cengage Learning Asia, 2016.
- ▶ Richard M. Martin, Electronic Structure, Cambridge University Press.
- ▶ Uichiro Mizutani: Introduction to the Electron Theory of Metals, Cambridge University Press, 2001.

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

Teilchen im Kasten, potentialfrei: Ansatz

▶ Modell

- ▶ 1D Kiste der Länge L
- ▶ kein Potential im Kasten

▶ Eigenwertproblem der Energie vergleichsweise einfach, da nur

- ▶ kinetische Energie der Elektronen zu berücksichtigen

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

- ▶ aus der kinetischen Energie $p = m_e v$ und $E = \frac{1}{2} m_e v^2$, d.h. $E = \frac{p^2}{2m_e}$
- ▶ folgt für die Schrödingergleichung

$$\frac{\hat{p}^2}{2m_e} \psi(x) = E\psi(x)$$

- ▶ bzw. mit dem Impulsoperator $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ bleibt als Eigenwertproblem:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \xrightarrow[\text{Einheiten}^*]{\text{atomare}} -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

- ▶ mit der Randbedingung $0 \leq x \leq L$ ($L =$ 'Kastlänge')

- ▶ **Eigenwerte:** $E \propto$ Quadrat der Quantenzahl n^2

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8m_e L^2}$$

- ▶ mit¹

$$k = \pm \frac{\pi}{L} n$$

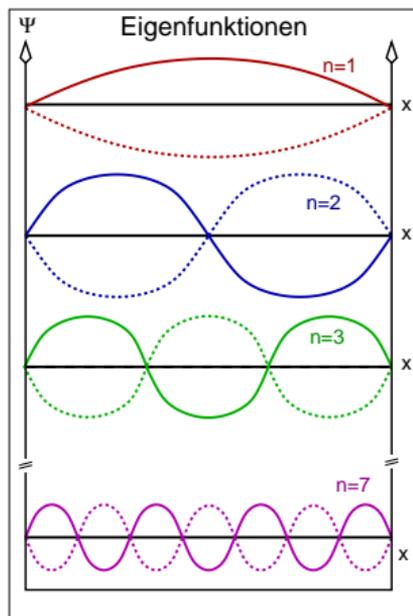
- ▶ folgt:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \xrightarrow[\text{Einheiten}]{\text{atomare}} E = \frac{1}{2} k^2$$

- ▶ **Eigenfunktionen:** ebene Wellen (PW^2) $\sin x$ und $\cos x$ bzw. e^{ikx}

$$\psi_n = e^{ik_n x} = \cos k_n x + i \sin k_n x \quad \text{mit} \quad k_n = \pm \frac{\pi}{L} n$$

¹ mit $n \in \mathbb{N}$, also 1, 2, 3 etc.; ²: PW = plane wave



Eigenfunktionen

- ▶ stehende Wellen mit Quantenzahl $n = \text{Zahl der 'Bäuche'}$, $n - 1$ Knoten
- ▶ s.a.: [Applet qm1d \(Falstad\)](#) bzw. [lokal](#)

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

▶ Vergleich der Lösung

$$\psi_n = e^{ik_n x} = \cos k_n x + i \sin k_n x$$

▶ mit der allgemeinen Wellengleichung

$$y = \cos \frac{2\pi}{\lambda} x$$

▶ zeigt, dass $\mapsto k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}$

▶ k ...

- ▶ normierte Quantenzahl
- ▶ 'Knotenzähler'
- ▶ $k_n \propto \frac{1}{\lambda_n}$ (Wellenzahl)
- ▶ Einheit einer reziproken Länge
- ▶ $k = 1\text{D}$ Vektor im Reziproken
- ▶ $k \propto$ Impuls der Elektronen ($p = \hbar k$), da

$$E = \underbrace{\frac{p^2}{2m_e}}_{\text{hinein}} = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}}_{\text{Ergebnis}}$$

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

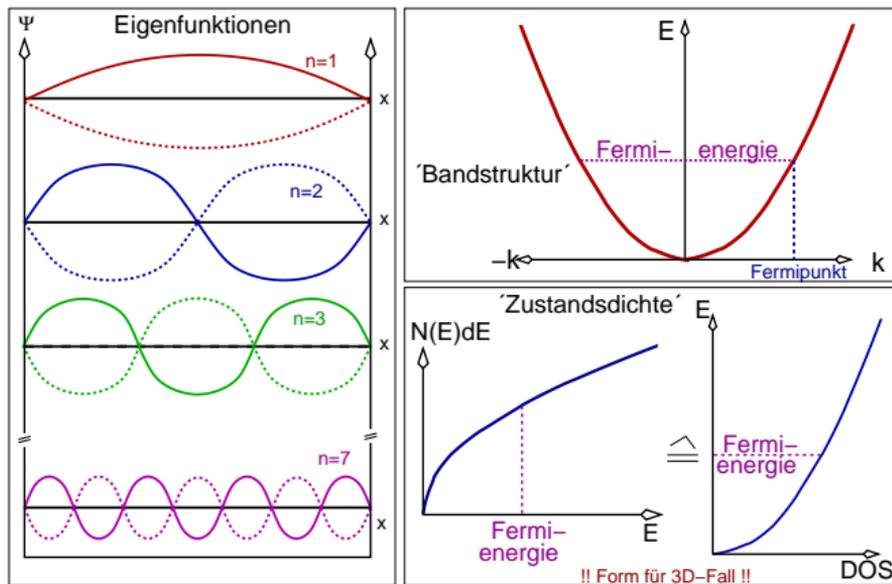
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



E -Eigenwerte (rechts)

- ▶ Plot: $E \rightarrow k =$ Bandstruktur (hier $E \propto k^2$)
- ▶ Zustandsdichte (DOS) = Zahl der Niveaus im E -Intervall Ableitung f. 3D
- ▶ Besetzung nach PAULI-Prinzip \mapsto maximale Energie = FERMI-Energie E_F
- ▶ $\mapsto k_{max} = k_F =$ FERMI-Punkt

1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

E_F und k_F

- ▶ FERMI-Energie E_F : maximale Energie der Elektronen
- ▶ FERMI-Punkt k_F : maximales k = Impuls der Valenzelektronen

typische Werte für E_F bei k_F (für Metalle)

Metall	e^- -Konzentration [cm^{-3}]	E_F [eV]	k [m^{-1}]	λ [m]
Na	$2.65 \cdot 10^{22}$	3.23	$0.92 \cdot 10^{10}$	$6.83 \cdot 10^{-10}$
Cu	$8.45 \cdot 10^{22}$	7.00	$1.36 \cdot 10^{10}$	$4.63 \cdot 10^{-10}$
Ca	$4.60 \cdot 10^{22}$	4.68	$1.11 \cdot 10^{10}$	$6.97 \cdot 10^{-10}$
Al	$18.06 \cdot 10^{22}$	11.63	$1.75 \cdot 10^{10}$	$3.59 \cdot 10^{-10}$
Sn	$14.48 \cdot 10^{22}$	10.03	$1.62 \cdot 10^{10}$	$3.88 \cdot 10^{-10}$

- ▶ E_F : 1.5 bis 15 eV
- ▶ $v \approx 1$ % der Lichtgeschwindigkeit c
- ▶ λ (DE-BROGLIE-Wellenlänge) ≈ 100 pm \approx Atomabstände
- ▶ \mapsto Wechselwirkung mit Kern/Rumpf-Potentialen



LOUIS-VICTOR
PIERRE RAYMOND
DE BROGLIE
(1892-1987)

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

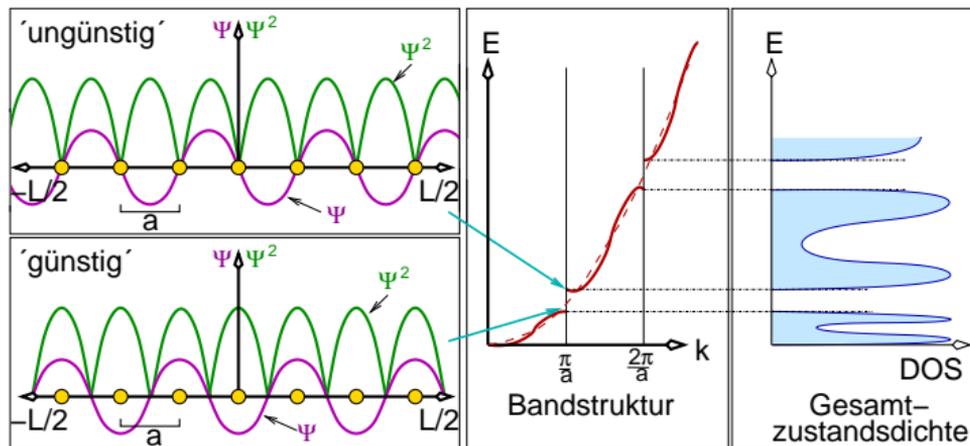
Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

- ▶ $\lambda \approx$ Gitterabstände \mapsto WW mit Kern/Rumpf-Potentialen
- ▶ **qualitativ:** für $\lambda = 2a$ d.h. wegen $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ bei $k = \frac{\pi}{a}$
 \mapsto 'günstige' und 'ungünstige' COULOMB-WW \mapsto Bandlücke (Bsp: $n = 7$)



- ▶ $\psi^2 \propto$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit für e^-
- ▶ bei $\lambda = 2a$ zwei Fälle unterscheidbar:
 - ① unten: günstig (COULOMB, Kompensation der Ladung der Kerne durch e^-)
 $\mapsto E$ günstiger als im potentialfreien Fall
 - ② oben: ungünstig $\mapsto E$ höher als im potentialfreien Fall

1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

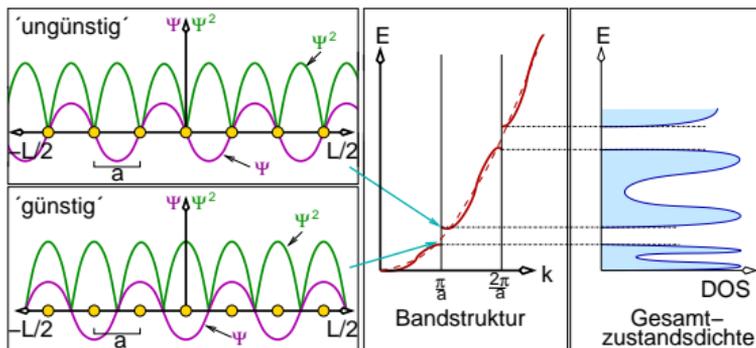
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



► Bandstruktur (Plot $E \rightarrow k$)

- gestrichelt = potentialfreie Parabel
- durch \oplus Potentiale: Energie/Band-Lücken bei $\frac{\pi}{a}$, $\frac{2\pi}{a}$, ...

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

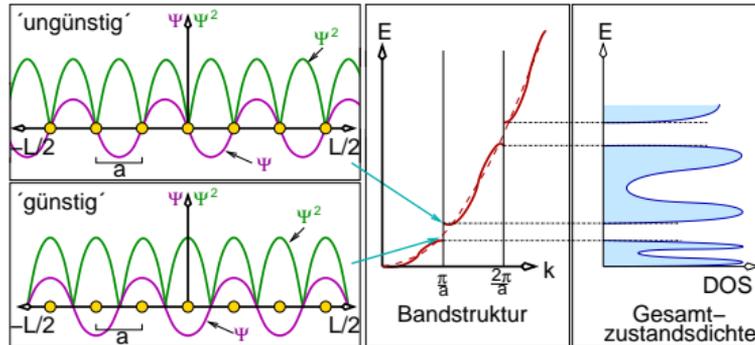
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



▶ Bandstruktur (Plot $E \rightarrow k$)

- ▶ gestrichelt = potentialfreie Parabel
- ▶ durch \oplus Potentiale: Energie/Band-Lücken bei $\frac{\pi}{a}$, $\frac{2\pi}{a}$, ...

▶ Zahl der e^- bei $k = \frac{\pi}{a}$??

- ▶ aus $k = \frac{\pi n}{L}$ folgt für die Zahl der Zustände bei k : $n = \frac{kL}{\pi}$
- ▶ am reziproken Ort $k = \frac{\pi}{a}$ sind damit $n = \frac{\pi L}{\pi a} = \frac{L}{a}$ Zustände besetzt
- ▶ bei 1 Atom/Gitterparameter a entspricht n damit der Gesamtzahl der Atome N (pro Atom 1 e^- -Paar)

▶ mit konkretem Beispiel von oben

- ▶ z.B. $a = 100$ pm, $L = 700$ pm \mapsto 'Kiste' enthält 7 Atome (1 Atom/EZ)
- ▶ $n = 7 \mapsto$ insgesamt 14 $e^- \mapsto 2e^-/\text{AO}$

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

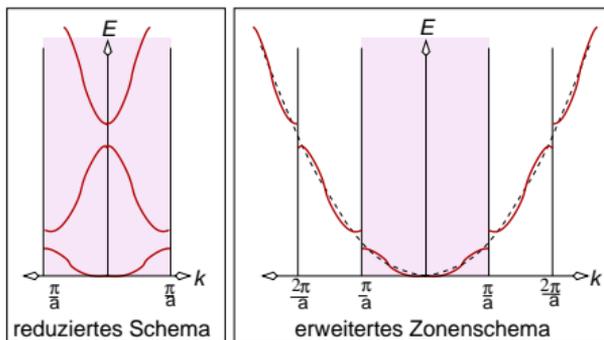
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

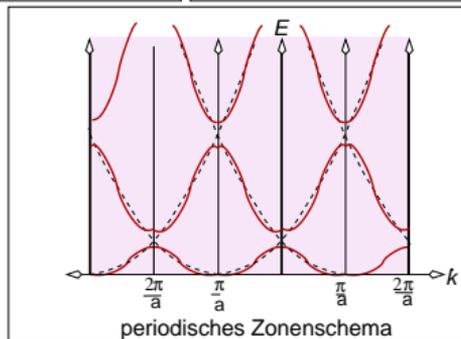


▶ erweitertes Zonenschema

- ▶ direkte Auftragung von E gegen k

▶ reduziertes Schema

- ▶ in kleinste Einheit im reziproken Raum zurückgefaltet
- ↳ 1. BRILLOUIN-Zone (BZ)
= WIGNER-SEITZ-Zelle (s.u.)
- ▶ jedes Band = $2 e^- / \text{EZ}$



- ▶ s.a. Applet 1D-Kristall (Falstad)
bzw. lokal



LÉON NICOLAS

BRILLOUIN

(1889-1969)¹

▶ periodisches Zonenschema

- ▶ aneinandergesetzte reduzierte Schemata
- ▶ nützlich für elektronische Transport-eigenschaften (s. V)

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

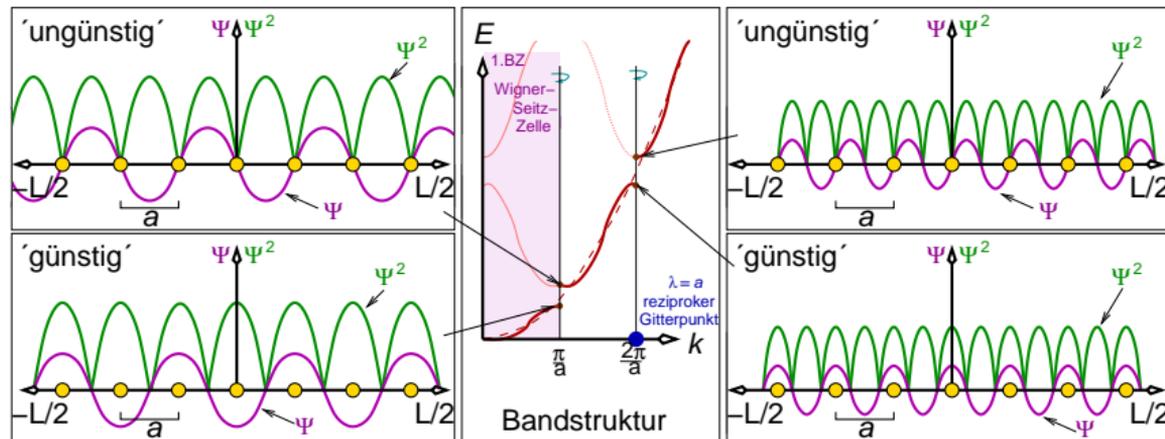
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



▶ reziproke Gitterpunkte

- ▶ bei $k = \frac{2\pi}{a}$ ist $\lambda = a \mapsto$ reziproker Gitterpunkt
- ▶ allgemein: an reziproken Gitterpunkten hat ψ die gleiche Translationsperiode wie das reale Gitter ($\lambda = na$)

▶ 1. BZ = WIGNER-SEITZ-ZELLE

- ▶ 'gefaltet' wird bei $k = \frac{\pi}{a}$ ($\lambda = \frac{a}{2}$, $2 e^-/\text{Atom}$)
- ▶ allgemein an der Mittelsenkrechten zwischen Γ und einem reziproken Gitterpunkt
- ▶ \mapsto 1. BZ = WIGNER-SEITZ-ZELLE des reziproken Gitters (s.u. für 2D und 3D)

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

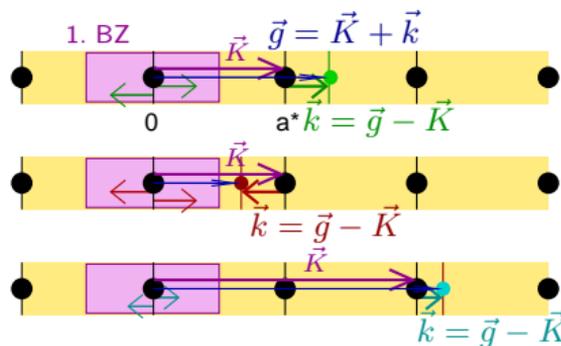
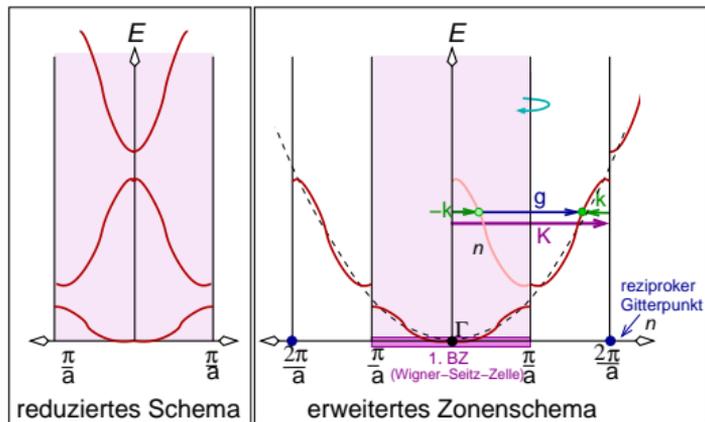
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



- ▶ Definition eines reziproken Gitters mit Gittervektoren \vec{K} (1D: reziproke Linie mit Gitterpunkten alle $\frac{2\pi}{a}$)
- ▶ jeder beliebige reziproke Vektor \vec{g} wird ausgedrückt als:

$$\vec{g} = \vec{K} + \vec{k}^n$$

- ▶ n : Bandindex
- ▶ \vec{k} -Raum ist zentrosymmetrisch (1D: nur Betrag entscheidend)
- ▶ alle \vec{k}^n in der WIGNER-SEITZ-ZELLE (1. BZ) (Konstruktion: Mittelsenkrechte)

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

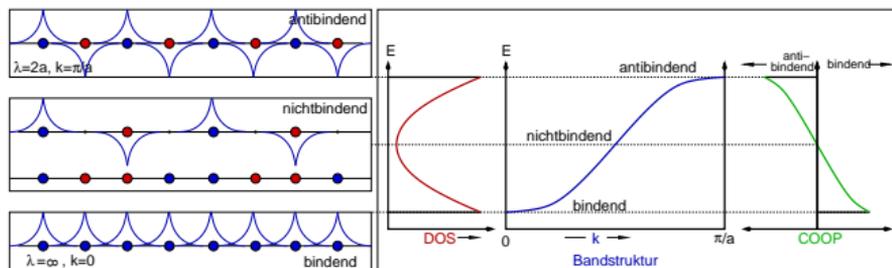
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



- ▶ **LCAO-Lösung** \uparrow (nach HÜCKEL), nur für $2 e^-$ /Atom (LC nur von 1s-AO)

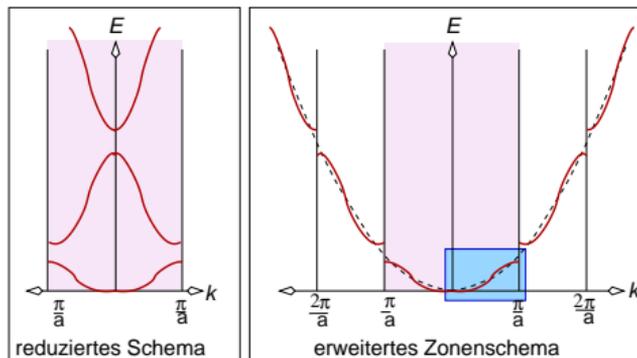
$$E_k = \alpha + 2\beta \cos ka$$

- ▶ **NFE-Lösung** \downarrow (für alle e^-)

- ▶ mit:

- ▶ α : 'COULOMB'-Integral
- ▶ β : 'Austausch'-Integral
- ▶ a : Atomabstand

- ▶ d.h. $E \sim \cos k$, für $0 \leq k \leq +\frac{\pi}{a}$



1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

① 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

② 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

③ 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

④ Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

- ▶ $E = f(k_x \text{ und } k_y)$, d.h. 2 Quantenzahlen
- ▶ $\vec{k} = \vec{g}$ spannt reziproke Fläche auf
- ▶ $E = f(k)$ noch in 3D darstellbar
- ▶ maximales E im k -Raum: FERMI-Linie (potentialfrei: Kreis)
- ▶ \vec{k} ist Vektor \mapsto Konstruktion reziproker Gitter
- ▶ 'Falten' analog 1D-Fall: $\vec{g} = \vec{K} + \vec{k}^n$ (n : Bandindex)

Applet stehende Wellen in 2D

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

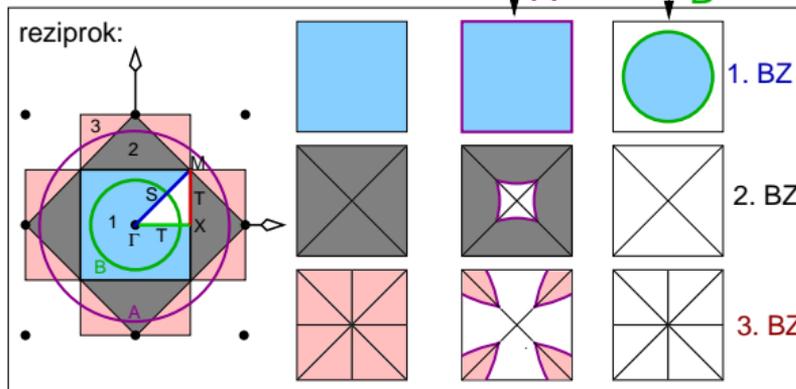
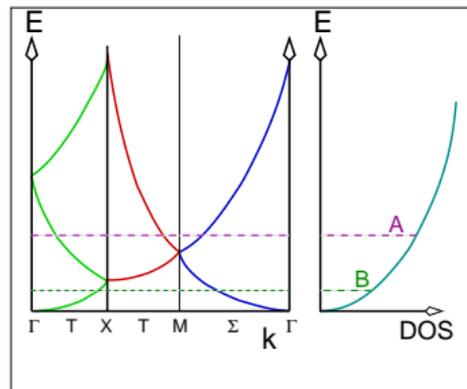
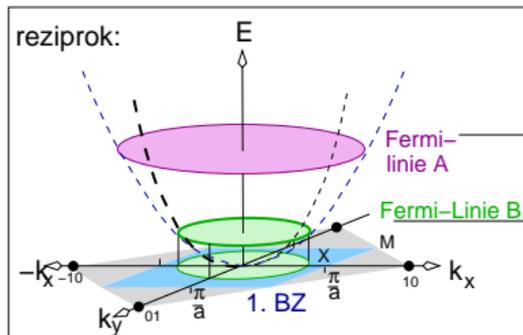
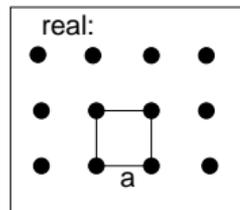
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

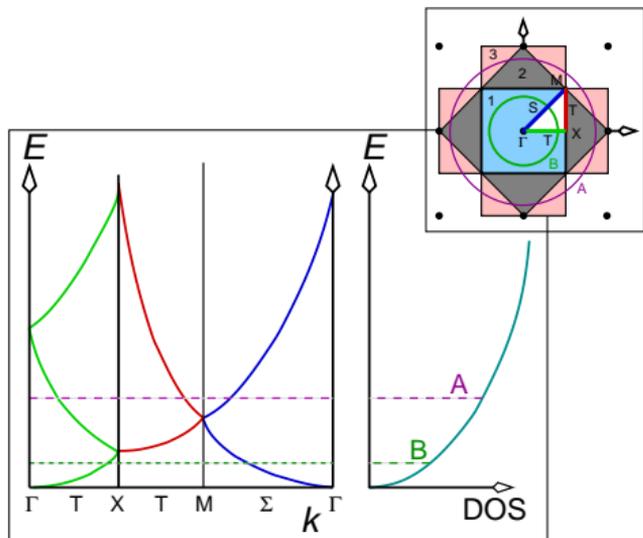
Bandstrukturen

FERMI-Flächen

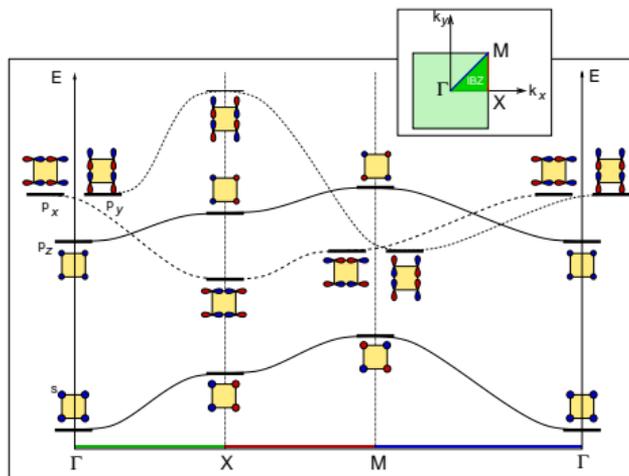
Zustandsdichten

Zusammenfassung

► NFE-Lösung ↓



► LCAO-Lösung ↓



1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

① 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

② 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

③ 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

④ Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

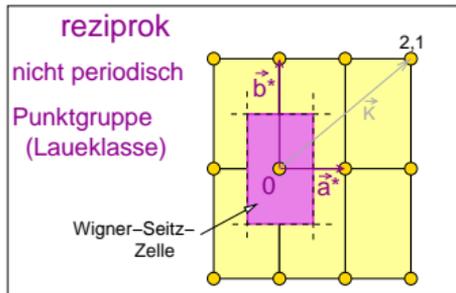
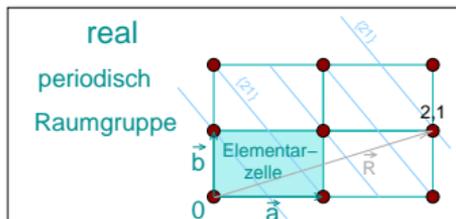
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



▶ Zu jedem realen (BRAVAIS-)Gitter mit den Gittervektoren

$$\vec{R} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (u, v, w: \text{ganzzahlig})$$

▶ \mapsto reziprokes Gitter mit Gittervektoren:

$$\vec{K} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad (h, k, l: \text{ganzzahlig})$$

▶ so dass gilt (! Definition 1 !)

$$e^{i\vec{K}\vec{R}} = 1 \quad \text{bzw.} \quad \vec{K}\vec{R} = 2\pi n$$

▶ ist erfüllt für (! Definition 2 !)

$$\vec{a}\vec{a}^* = 1 \quad \text{usw. und} \quad \vec{a}\vec{b}^* = 0 \quad \text{usw.}$$

$$\text{d.h.} \quad \vec{a}^* \perp \vec{b} \quad \text{und} \quad \vec{c} \quad \text{usw.}$$

$$\text{bzw. exakt:} \quad \vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_{EZ}}(\vec{b} \times \vec{c}) \quad \text{usw.}$$

▶ Vorteil: Jede ebene Welle $\psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \psi_0 e^{i\vec{K}\vec{r}}$ ist gitterperiodisch, denn

$$\psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{K}}(\vec{r} + \vec{R}) \quad (\equiv \text{Periodizität})$$

$$\psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \psi_0 e^{i\vec{K}\vec{r}} = \psi_0 e^{i\vec{K}(\vec{r} + \vec{R})} = \psi_0 e^{i\vec{K}\vec{r}} \underbrace{e^{i\vec{K}\vec{R}}}_{=1!}$$

1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

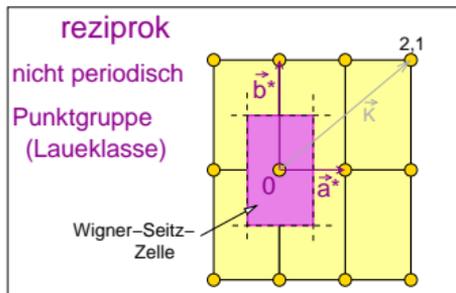
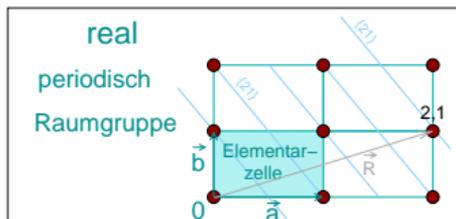
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



- ▶ punktsymmetrisch (Laeklasse)
- ▶ Ursprung im Zentrum des reziproken Gitters (Γ -Punkt)
- ▶ 'Elementarzelle': WIGNER-SEITZ-Zelle (Polyeder mit den Mittelsenkrechten zwischen dem Ursprung und allen benachbarten Gitterpunkten als Flächen)
- ▶ enthält genau einen reziproken Gitterpunkt
- ▶ \equiv 1. BRILLOUIN-Zone
- ▶ für die Beugung:
 - ▶ der reziproke Gittervektor K_{hkl} steht senkrecht auf der Netzebenenschar $\{hkl\}$
 - ▶ das Skalarprodukt $\vec{K}\vec{r} = hx + ky + lz$ beschreibt den Abstand des Punktes \vec{x} von der Netzebenenschar \vec{h} (Phasendifferenz).

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

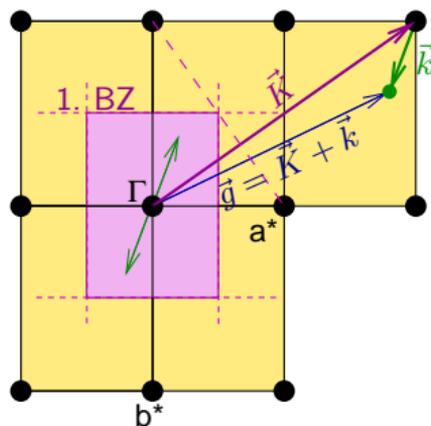
Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

- ▶ \vec{g} spannen gesamte reziproke Fläche auf
- ▶ maximales E im k -Raum: FERMI-Linie (potentialfrei: Kreis)
- ▶ 'Falten' analog 1D-Fall: $\vec{g} = \vec{K} + \vec{k}^n$ (n : Bandindex = MILLER-Indizes)
- ▶ \vec{k}^n liegen in der WIGNER-SEITZ-Zelle (1. BZ)
- ▶ 1. BZ: begrenzt durch Mittelsenkrechte zwischen Γ und nächsten \vec{K}



- ▶ ebene Wellen mit $\vec{g} = \vec{K}$ (d.h. $\vec{k}^n = \vec{0}$) haben die Periodizität des Gitters

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

- 1 Skizzieren Sie die Elementarzelle und die Struktur einer Schicht von Graphit (alles nur 2-dimensional!).
(Tipp: Auf einem Karopapier geht ein hexagonales Muster gut, wenn man eine Kante 5 Kästchen horizontal zeichnet und die zweite Kante $3x + 4y$ Kästchen gedreht ansetzt.)
- 2 Zu welcher Flächengruppe gehört die Struktur? Welche Punktgruppe und welche LAUE-Klasse liegen vor?
- 3 Konstruieren Sie das reziproke Gitter (am besten: a^* doppelt so lang wie a etc.).
- 4 Konstruieren Sie dazu die 1. und die 2. BRILLOUIN-Zone.
- 5 Welche 2D Punktgruppe hat das reziproke Gitter?
- 6 Zeichnen Sie den irreduziblen Teil der BZ ein.
- 7 Zeichnen Sie die speziellen Punkte M $(\frac{1}{2}, 0)$ und K $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ein.
- 8 für IV: Wie erklärt sich hieraus die energetische Lage der beiden C- p_z -Bänder bei M und der Bandverlauf von Γ nach M.

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

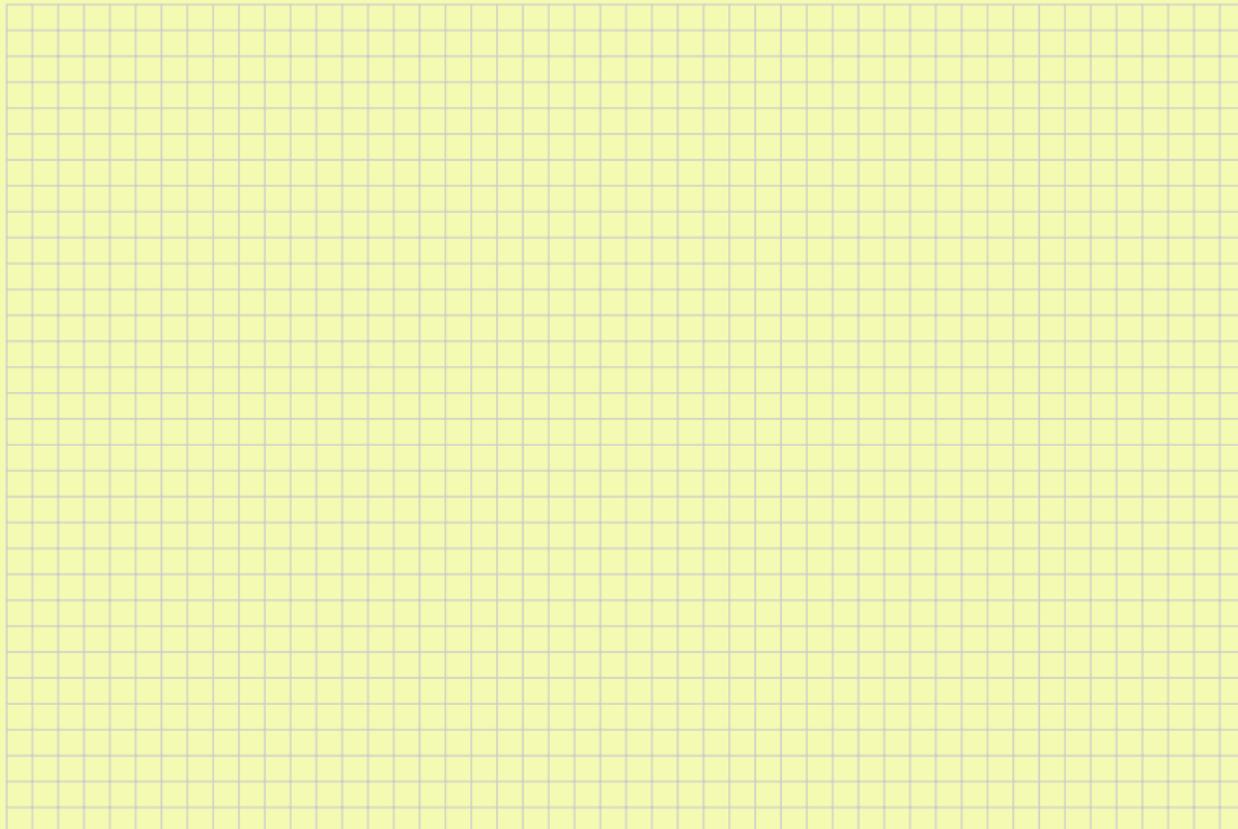
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

Bedeutung von $\vec{k}\vec{r}$ als Phase bei Streuprozessen

- **Elektronische Strukturen:** e^- (E : [eV])

- ▶ LCAO (BLOCH-Summen): $\psi = \sum_j \phi_j e^{i\vec{k}n\vec{a}}$

- ▶ mit: $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}$

- ▶ $\vec{k} = 0$: MO-Schema (**M**:¹ ΔE aus UV/vis- oder UPS/XPS-Spektroskopie)

- ▶ \vec{k} beliebig: Bandstruktur $E(\vec{k})$ (**M**: ΔE mittels ARPES etc.)

- **Gitterdynamik:** Phononen (E : [meV])

- ▶ Elemente der dynamischen Matrix: $D_{kk'} = \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{l'} V_{kl,k'l'} e^{i\vec{q}\vec{r}_{l-l'}}$

- ▶ mit: \vec{q} : Wellenvektor

- ▶ $\vec{q} = 0$: Schwingungsenergien (**M**: ΔE : IR/Raman-Spektroskopie)

- ▶ \vec{q} beliebig: Phonondispersion $E(\vec{q})$ (**M**: inelastische n -Streuung)

- **Beugung:** Photonen (Röntgen); e^- (E : [keV]); n

- ▶ positive Interferenz (Reflex) \mapsto Streuvektor $\vec{s} =$ reziproker Gittervektor \vec{K}

- ▶ **M**: Intensitätsgewichtetes reziprokes Gitter

- ▶ $F_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i(\vec{h}\vec{x}_j)} = \int \rho_{\vec{x}} e^{2\pi i\vec{h}\vec{x}} dV$

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

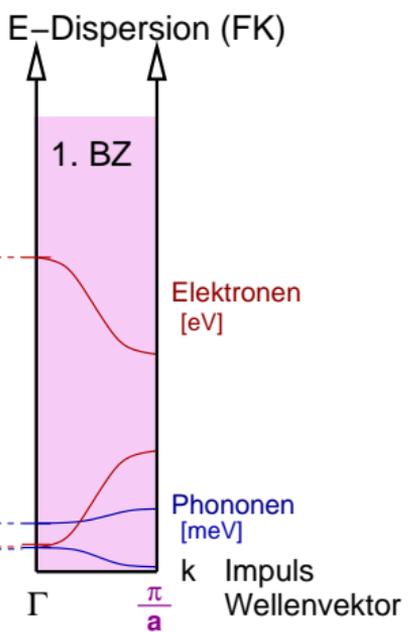
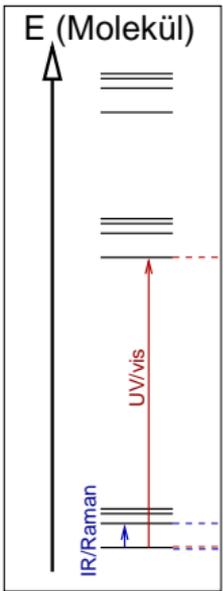
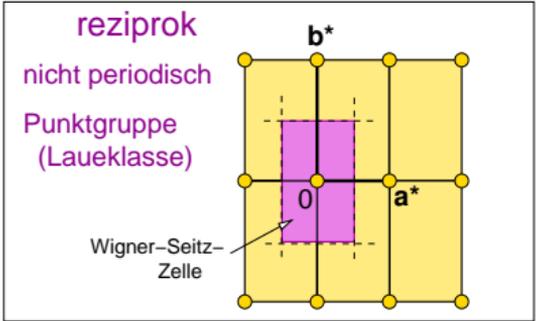
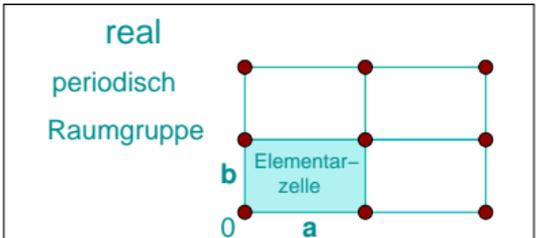
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



- 1-dimensionaler Fall
 - Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)
 - Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe
- 2-dimensionaler Fall
 - Allgemeines
 - Beispiel: Squarium
 - Reziprokes Gitter, k-Flächen/-Raum, BZ
- 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle
 - Allgemeines
 - Bandstrukturen
 - FERMI-Flächen
 - Zustandsdichten
- Zusammenfassung

① 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

② 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

③ 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

④ Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

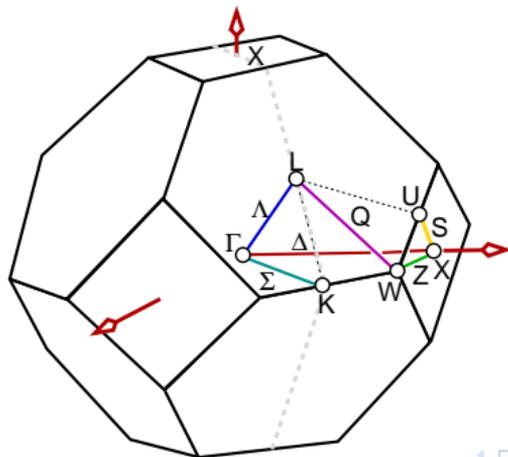
Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

- ▶ \vec{k} : 3 Komponenten \mapsto Vektoren im k -Raum mit Endpunkten $k_{x,y,z}$
- ▶ Plot $E \rightarrow \vec{g}$ würde 4D erfordern \mapsto nur 'Spaghetti'-Plots möglich
- ▶ k_F : FERMI-Fläche (Potentialfrei: Kugel)
- ▶ Konstruktion der 1. BZ analog 2D-Fall
- ▶ alle BZ parkettieren den reziproken Raum
- ▶ Benennung spezieller Punkte und Pfade \mapsto [Bilbao Crystallographic Server](#)
- ▶ !! eigene Benennungen im Umlauf
- ▶ Beispiel: 1. BZ des f.c.c.-Gitters



1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

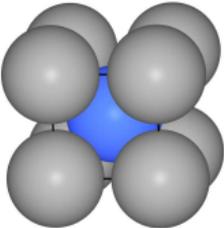
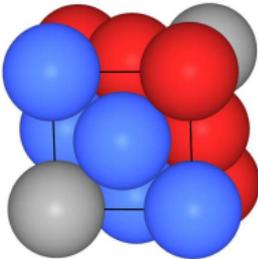
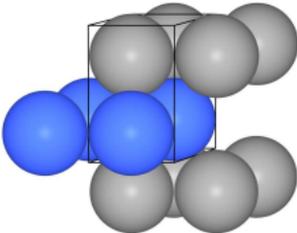
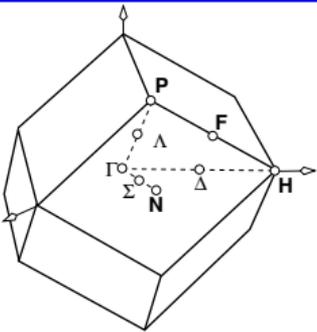
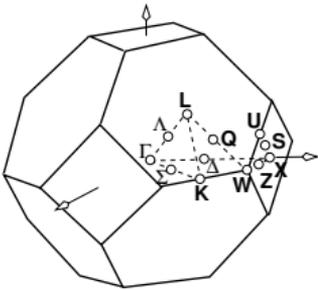
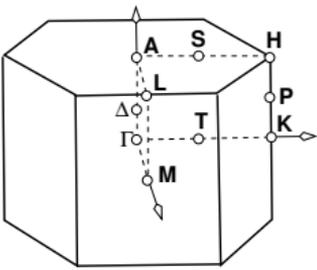
Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

BRILLOUIN-Zonen der drei Basis-Metallstrukturen

	b.c.c.	f.c.c.	h.c.p.
Name	W-Typ, A2	Cu-Typ, A1	Mg-Typ, A3
EZ			
1. BZ	 <p>Rhombendodekaeder</p>	 <p>gekapptes Oktaeder</p>	 <p>hexagonales Prisma</p>

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

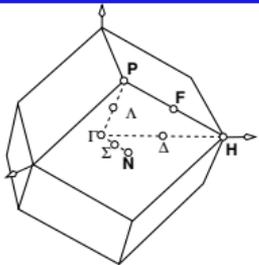
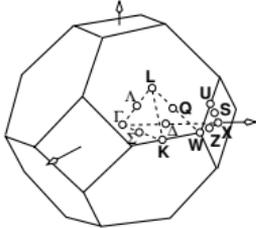
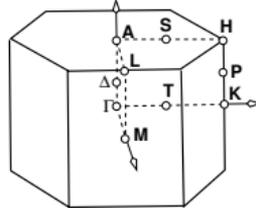
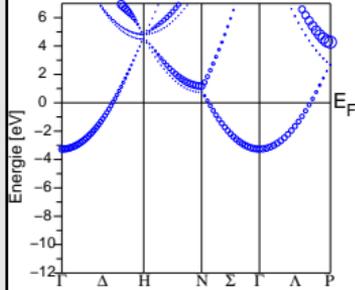
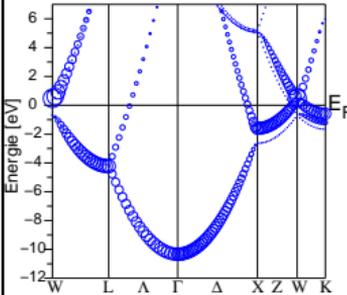
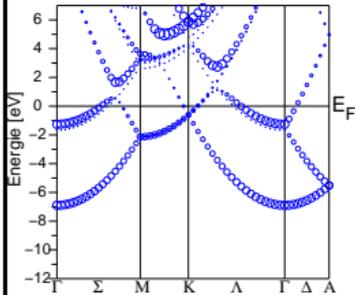
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

	b.c.c.	f.c.c.	h.c.p.
Name	W-Typ, A2	Cu-Typ, A1	Mg-Typ, A3
1. BZ			
Beispiel	Na	Al	Mg
Bandstruktur			
Atome/pEZ	1 (1 v.e./EZ)	1 (3 v.e./EZ)	2 (4 v.e./EZ)

1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

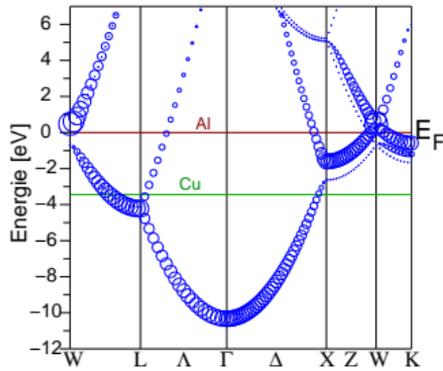
Allgemeines

Bandstrukturen

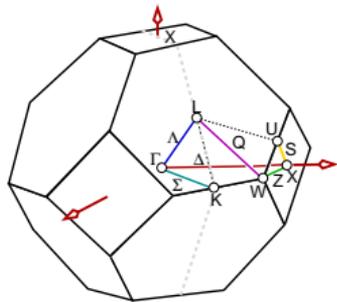
FERMI-Flächen

Zustandsdichten

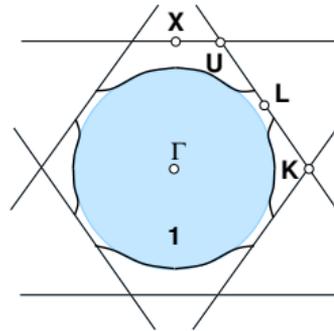
Zusammenfassung



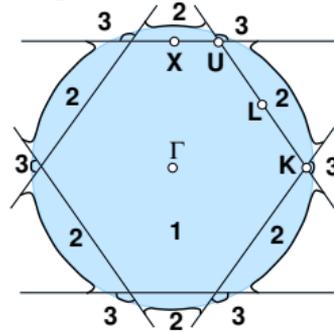
Al (+ E_F von Cu)



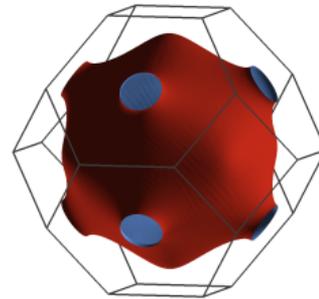
BRILLOUIN-Zone



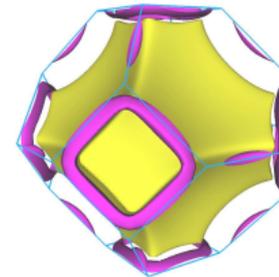
Kupfer: 1 v.e.



Aluminium: 3 v.e.



▶ Cu (vrml)



▶ Al, 2. Band (vrml)

▶ Al, 3. Band (vrml)

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,

einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

① 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

② 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

③ 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

④ Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

	b.c.c.	f.c.c.	h.c.p.
Name	W-Typ, A2	Cu-Typ, A1	Mg-Typ, A3
Beispiel	Na	Cu	Mg
Bandstruktur			
FERMI-Fläche			<p>gelb/violett 2./3. Band</p>
v.e.	1 v.e./EZ	1 v.e./EZ	4 v.e./EZ

1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

Zustandsdichten (DOS) für Teilchen im 3D-Kasten (potentialfrei, ungefaltet, $\vec{k} = \vec{g}$)

- ▶ analog 1D-Fall ($k_n = \frac{2\pi}{L}n$) \mapsto 3D: zu jedem $\vec{k}_{x,y,z}$ gehört ein reziprokes Volumeninkrement $\Delta V^* = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$

- ▶ Gesamtzahl erlaubter Niveaus (inkl. Spin) in einer Kugel mit Radius k und Volumen $V^* = \frac{4}{3}\pi k^3$:

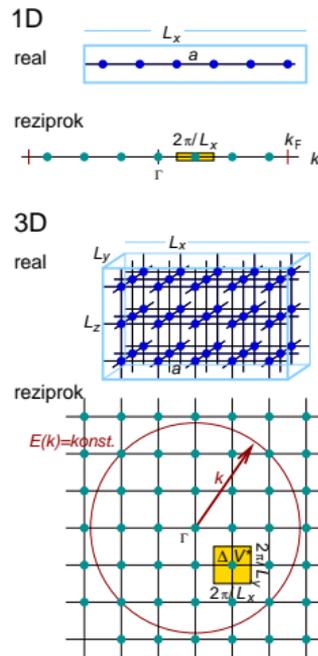
$$N = 2 \frac{V^*}{\Delta V^*} = 2 \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k^3 \quad \text{und damit} \quad k = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$$

- ▶ Einsetzen in $E = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2$ ergibt

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} \quad \text{und damit} \quad N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e E}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

- ▶ die Gesamtzahl N der Zustände bis zur Energie E .
- ▶ Für die Zustandsdichte DOS ($D(E)$) folgt daraus:

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \quad \text{bzw. allgemein:} \quad D(E) \propto \sqrt{E}$$



1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

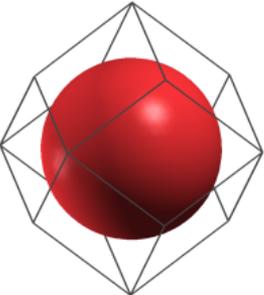
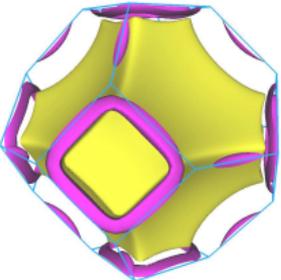
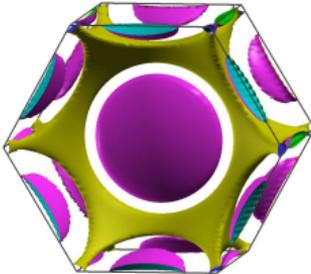
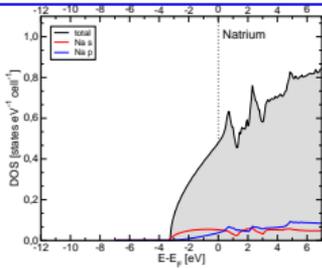
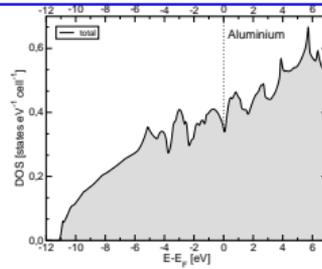
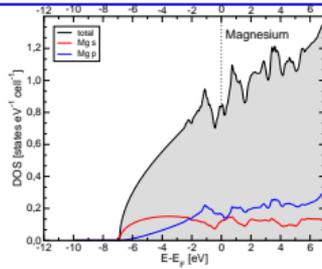
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

	b.c.c.	f.c.c.	h.c.p.
Name	W-Typ, A2	Cu-Typ, A1	Mg-Typ, A3
Beispiel	Na	Al	Mg
FERMI-Fläche			
		gelb/violett 2./3. Band	gelb/violett 2./3. Band
DOS			

1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

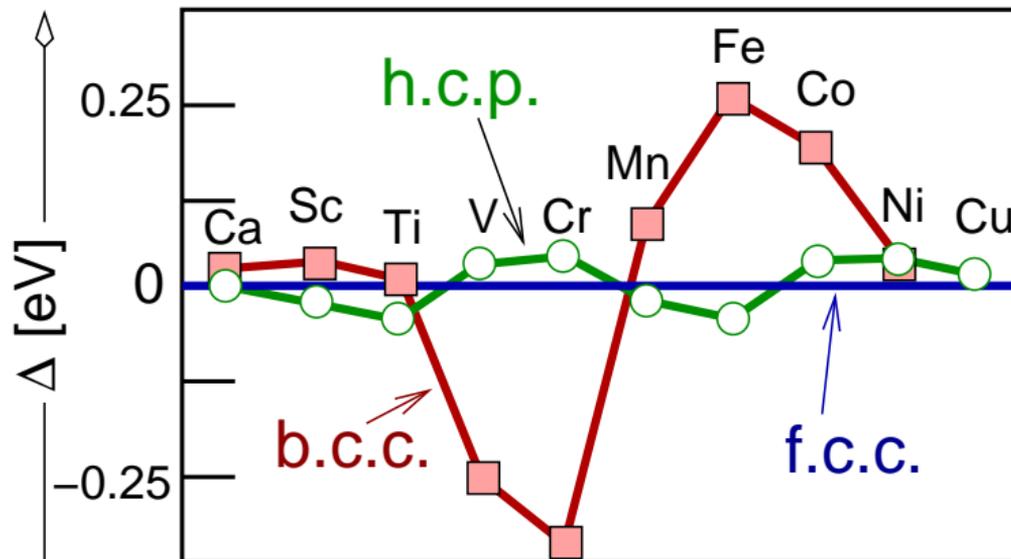
Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung



(! die Kristallstrukturen der magnetischen Elemente Fe und Co werden hier nicht korrekt vorausgesagt!)

1-dimensionaler Fall

 Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

 Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

 Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

 3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1 1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten, potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe

2 2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter, k -Flächen/-Raum, BZ

3 3-dimensionaler Fall, einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

4 Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rumpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

1-dimensionaler Fall

Teilchen im Kasten,
potentialfrei (Wdh.)

Teilchen im Kasten, mit
periodischem Potential der
Rümpfe

2-dimensionaler Fall

Allgemeines

Beispiel: Squarium

Reziprokes Gitter,
 k -Flächen/-Raum, BZ

3-dimensionaler Fall,
einfache Metalle

Allgemeines

Bandstrukturen

FERMI-Flächen

Zustandsdichten

Zusammenfassung

- ▶ NFE-Ansatz = Teilchen im Kasten $\mapsto \psi_k = \text{PW}$
- ▶ k als Quantenzahl, Wellenzahlvektor, Impuls
- ▶ E -Änderungen bei periodischen Potentialen an den Stellen $\frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, \dots$
- ▶ Zurückfalten der Bänder \mapsto Translationssymmetrie \mapsto reziprokes Gitter
- ▶ NFE- (II) und LCAO-Ansatz (I) führen zu ähnlichen Ergebnissen und der gleichen Darstellung von Bandstrukturen
- ▶ LCAO (z.B. Hückel, LMTO-ASA usw.) günstig für kovalentere Systeme (I)
- ▶ NFE/PW günstiger für metallische Systeme (II = hier)
- ▶ 'praktikable' Festkörpertheorie: 'Mischung' aus LCAO (Atom-artige Basisfunktionen) und NFE (PW, ebene Wellen) (III = nächste Woche)