

Bandstrukturen II: NFE-Ansatz

(Tight-Binding Methode)

AFP-Seminar, CR

Bandstrukturen II: NFE-Ansatz

- 1. 1-dimensionaler Fall \Leftarrow
 - ◇ 1.1. Teilchen im Kasten, potentialfrei \Leftarrow
 - ◇ 1.2. Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe
- 2. 2-dimensionaler Fall: Squarium
- 3. 3-dimensionaler Fall: Cubium

1.1. Teilchen im Kasten, potentialfrei: Ansatz (VL 6 oben)

- Modell
 - ◇ 1D Kiste der Länge L
 - ◇ kein Potential im Kasten
- Eigenwertproblem der Energie vergleichsweise einfach, da nur
 - ◇ kinetische Energie der Elektronen zu berücksichtigen

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

- ◇ für den Operator \hat{H} der kinetischen Energie folgt wieder aus $p = m_e v$ und $E = \frac{1}{2} m_e v^2$

$$E = \frac{p^2}{2m_e}$$

- ◇ und damit für die Schrödinger-Gleichung

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

- ◇ mit dem Impulsoperator $p = \hbar \frac{\delta}{\delta x}$ bleibt als Eigenwertproblem:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\delta^2}{\delta x^2} \psi(x) = E\psi(x)$$

1.1. Teilchen im Kasten, potentialfrei: Lösungen des Eigenwertproblem

- Satz von Energieeigenwerten und Energieeigenfunktionen
- Eigenwerte: $E \propto$ Quadrat der Quantenzahl n^2 ($L =$ 'Kastenlänge')

$$E = \frac{h^2 n^2}{8m_e L^2}$$

- mit

$$k = \pm \frac{2\pi}{L} n$$

- wird die Lösung unabhängig von der Kastenlänge L :

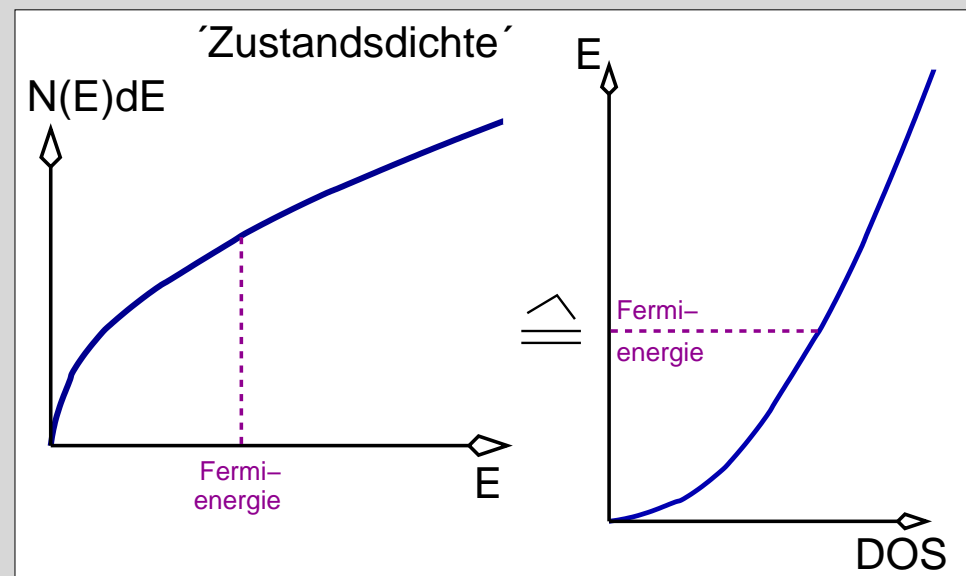
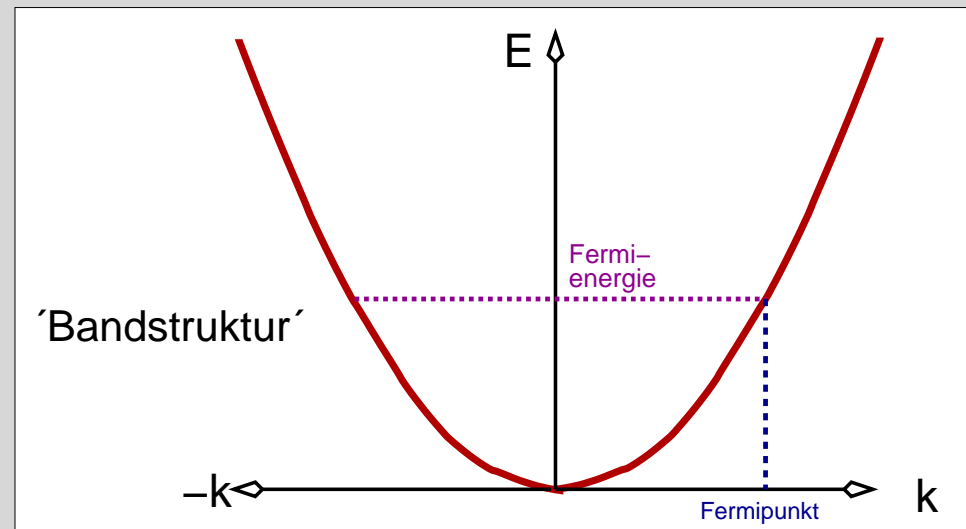
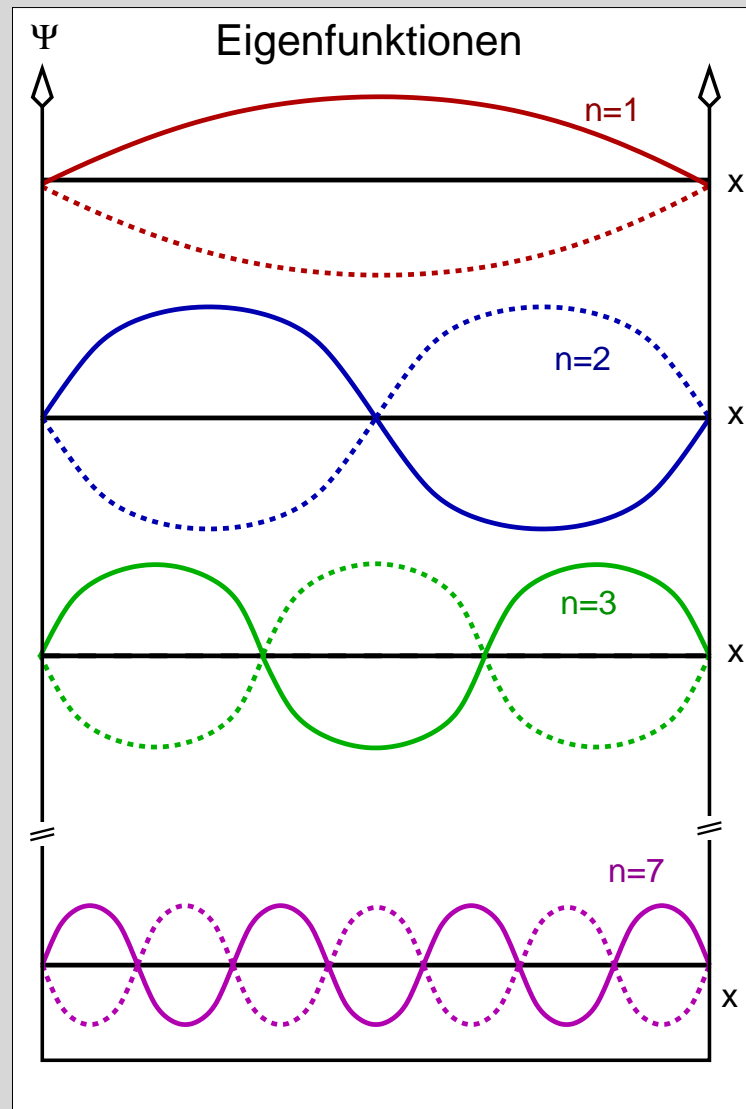
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

- Eigenfunktionen: (Wellenfunktionen \sin und \cos bzw. e^{ikx})

$$\psi = e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx$$

$$k = \pm \frac{2\pi}{L} n = \frac{2\pi}{\lambda}$$

1.1. Teilchen im Kasten, potentialfrei: gr. Darst. der Lösungen (VL 6 ob)



- Eigenfunktionen (links)
 - ◇ stehende Wellen mit n als Zahl der Bäuche

1.1. NFE: Vergleich mit Wellengleichung/Bedeutung von k

- direkter Vergleich der allgemeinen Wellengleichung

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

- mit der Lösung

$$\psi = e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx$$

- zeigt dass \mapsto

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

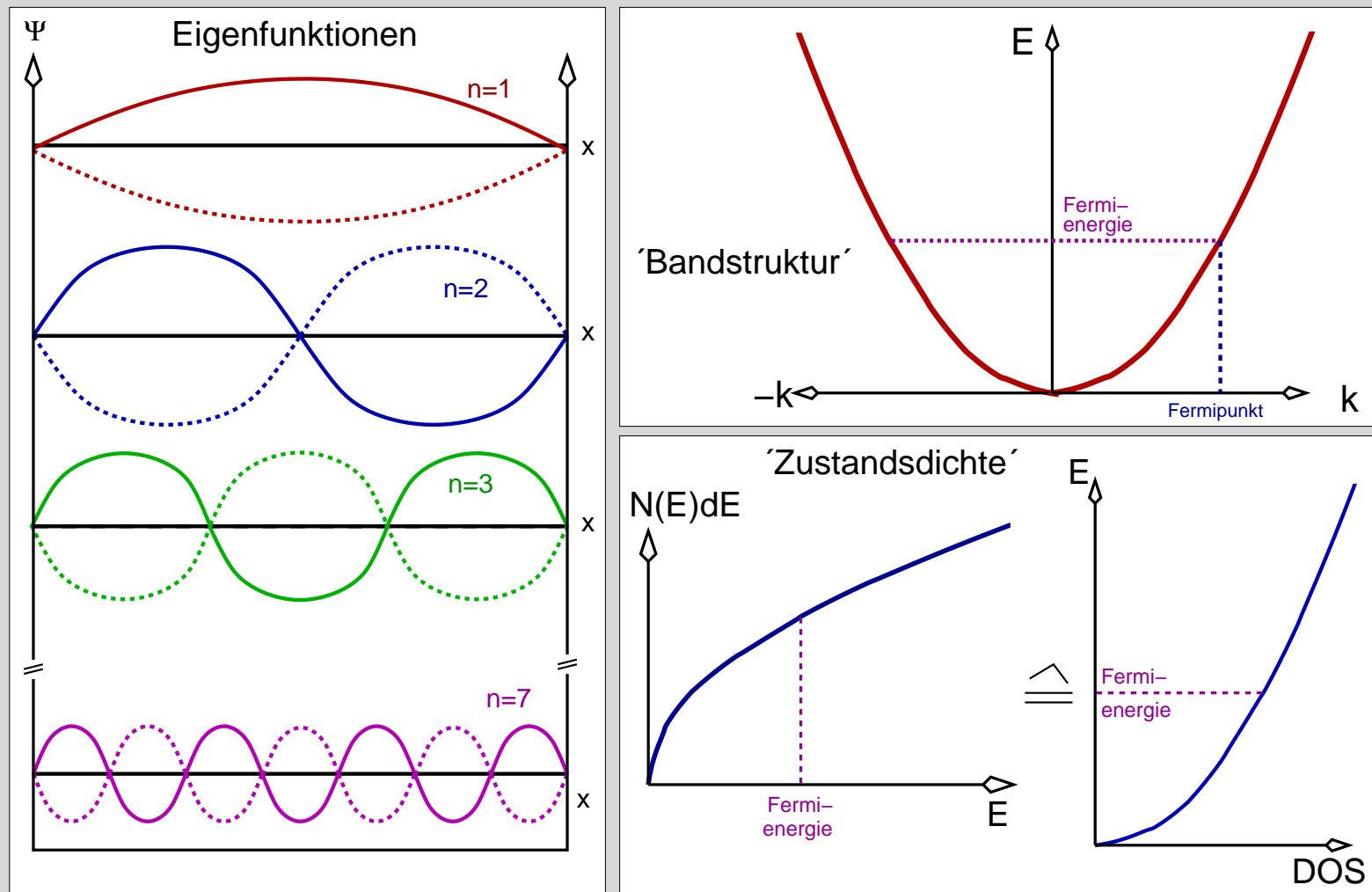
- k ...

- ◇ $k \propto \frac{1}{\lambda}$
- ◇ hat die Einheit einer reziproken Länge
- ◇ ist eine normierte Quantenzahl
- ◇ $k \propto$ Impuls der Elektronen ($p = \hbar k$), da

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

- ◇ $k = 1D$ Vektor \mapsto spannt reziproken Raum auf (hier reziproke Linie)

1.1. NFE: Energie-Eigenwerte (VL 6 oben)



- E-Eigenwerte (rechts)

- ◇ Plot: $E \rightarrow k =$ Bandstruktur (hier quadratisch: $E \propto k^2$)
- ◇ Zustandsdichte (DOS) = wie viele E-Niveaus liegen im Energie-Intervall (auch E nach oben)
- ◇ Besetzung nach Pauli-Prinzip \mapsto maximale Energie = Fermienergie E_F
- ◇ $\mapsto k_{\max} =$ Fermipunkt (Linie, Fläche)

1.1. NFE: Fermi-Energie

- E_F, k_F
 - ◇ Fermienergie E_F : maximale Energie der Elektronen
 - ◇ Fermipunkt k_F : maximales k = Impuls der Elektronen
- typische Werte von E_F bei k_F :
 - ◇ 1.5 bis 15 eV
 - ◇ $v = 1$ % der Lichtgeschwindigkeit c
 - ◇ λ ca. 100 pm
 - ◇ de-Broglie-Wellenlänge λ der e^- nahe $E_F \mapsto$ in der Größenordnung von Atomabständen
 - ◇ \mapsto Beugung = Impulsänderungen = Kern/Rumpf-Potentiale wichtig

Bandstrukturen II: NFE-Ansatz

- 1. 1-dimensionaler Fall ✓
 - ◇ 1.1. Teilchen im Kasten, potentialfrei ✓
 - ◇ 1.2. Teilchen im Kasten, mit periodischem Potential der Rumpfe
- 2. 2-dimensionaler Fall: Squarium
- 3. 3-dimensionaler Fall: Cubium