

# 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  $L$ :

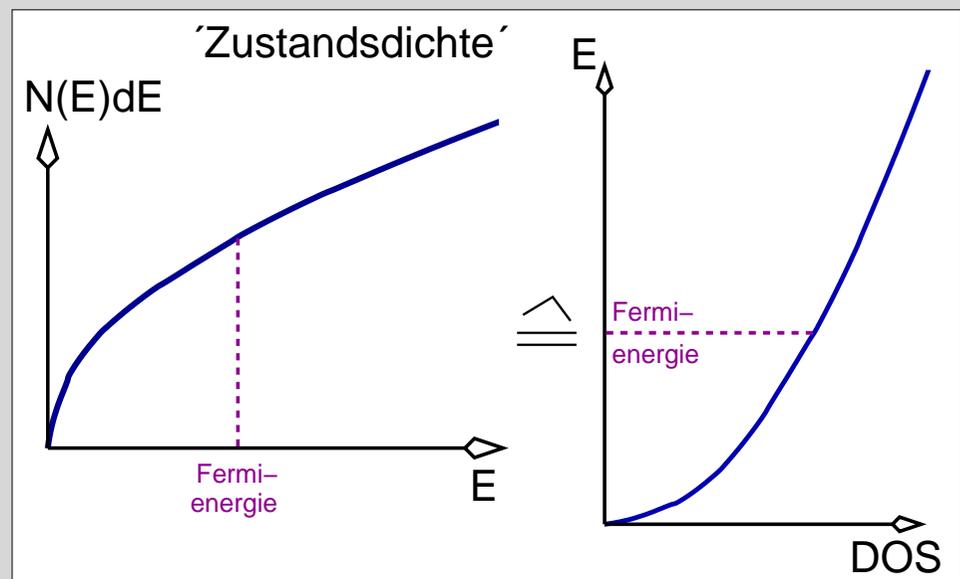
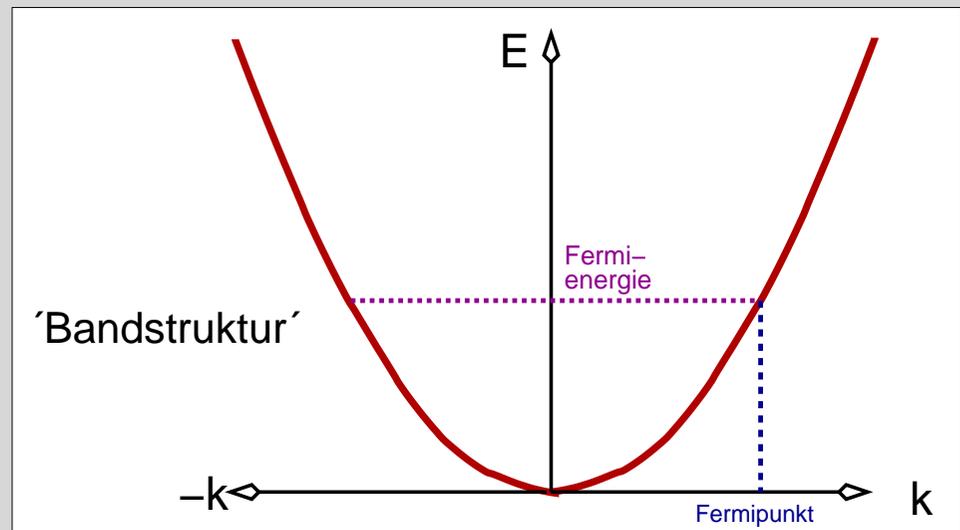
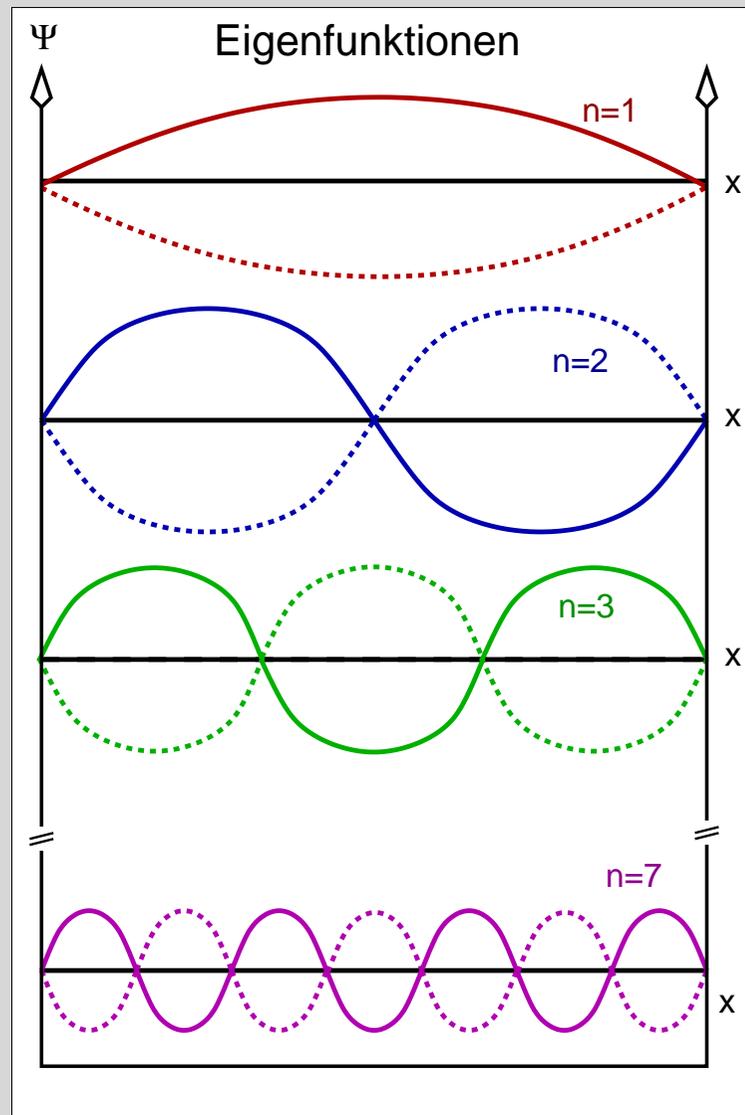
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

- 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  $\mapsto$

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

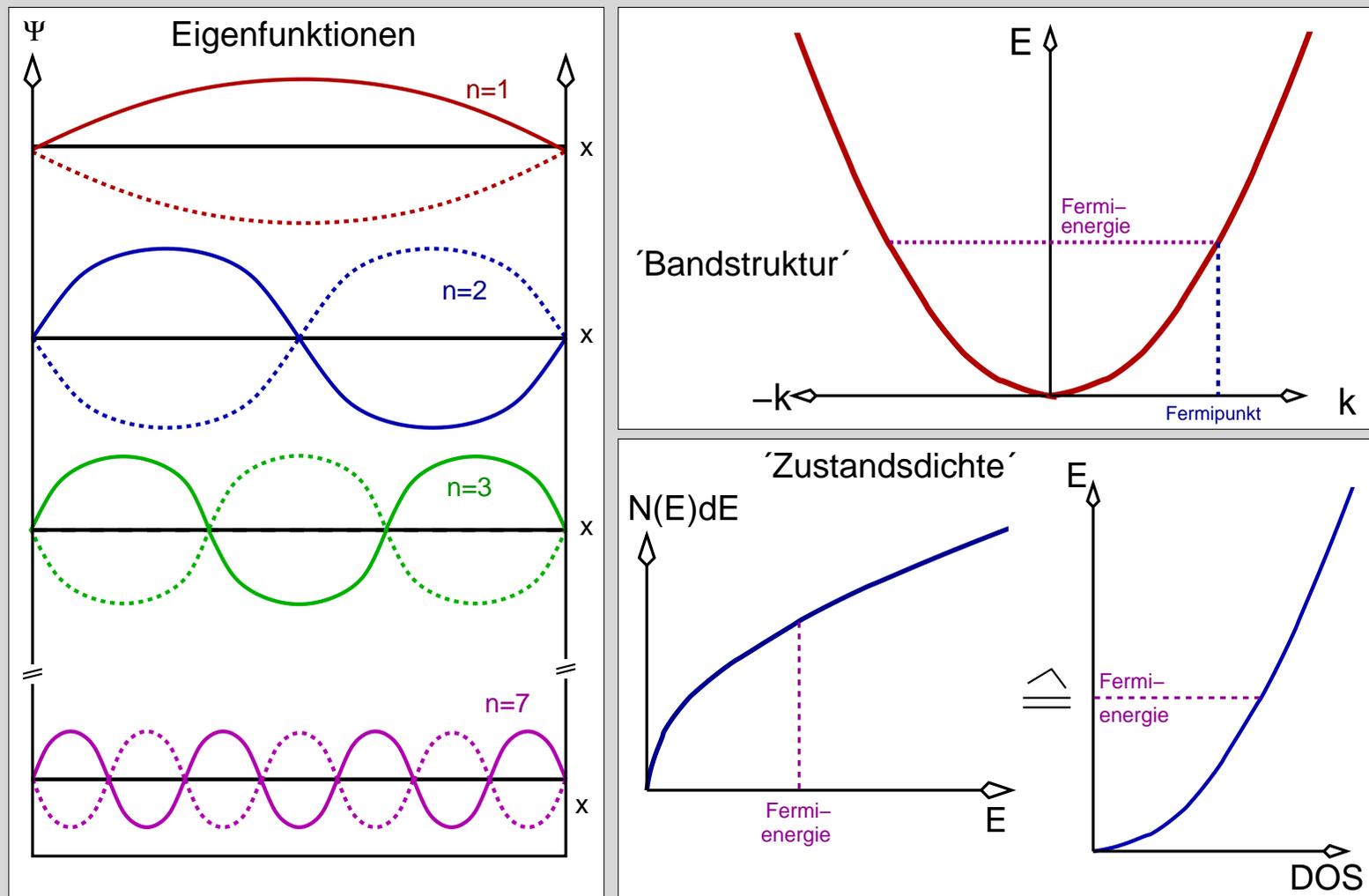
- $k$  ...

- ◇  $k \propto \frac{1}{\lambda}$
- ◇ 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  $E_F$
- ◇  $\mapsto k_{\max} = \text{Fermipunkt}$  (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  $c$
  - ◇  $\lambda$  ca. 100 pm
  - ◇ de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda$  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