

Hall - Effekt

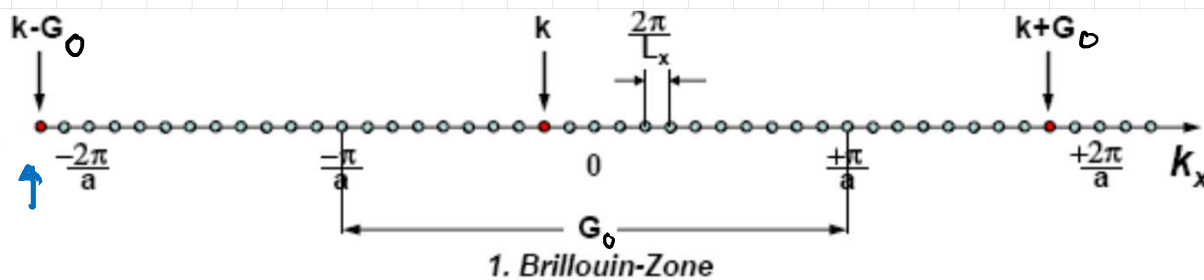
$$E_y = B \cdot A_H \cdot j_x ; A_H = -\frac{1}{ne} \quad \begin{cases} A_H \text{ positiv?} \\ \text{Quanten-Hall-E.?} \end{cases}$$

Bloch - Theorem

$$\begin{aligned} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ u_{n\vec{k}}(\vec{r}) &= u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) \end{aligned} \quad (\Rightarrow) \quad \psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

Hauptgleichung

$$\left(\frac{\hbar k^2}{2m} - E \right) c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} c_{\vec{k} - \vec{G}} = 0$$



Energie eigenwerte zu \vec{k} : $E_{1\vec{k}} \leq E_{2\vec{k}} \leq E_{3\vec{k}} \leq \dots E_{n\vec{k}}$

Eigenfunktionen zu \vec{k} : $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{n\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G}) \cdot \vec{r}}$

periodische Randb. $\vec{k}_i = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i \quad m_i \in \mathbb{Z}$

Schlussfolgerungen aus Bloch-Theorem

1.) Freie Elektronen: $\hbar \vec{k} = \vec{p}$; $\Psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$ $\hat{p} \Psi_{\vec{k}} = \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\vec{k}} = \hbar \vec{k} \Psi_{\vec{k}}$

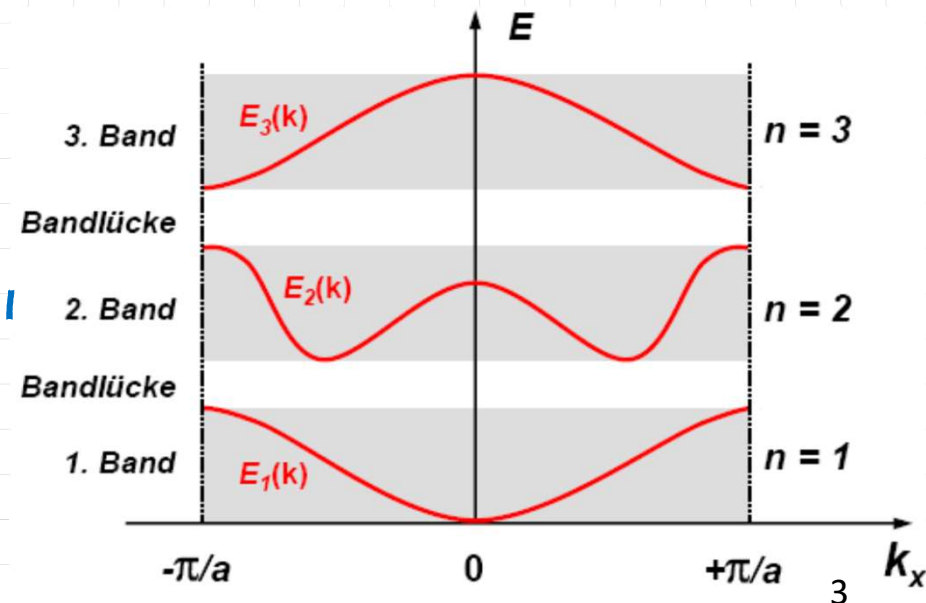
Blockwellen: $\psi_{n\vec{k}} = u_{n\vec{k}} \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}$

$$\hat{p} \psi_{n\vec{k}} = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{i} \nabla u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \neq \text{const} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$\hbar \vec{k}$ ist kein Eigenwert des Impulsoperators. $\hbar \vec{k}$ ist Kristallimpuls.
Wegen diskreter Translationssymmetrie ist $\hbar \vec{k}$ nur bis auf \vec{G} erhalten.

2) \vec{k} ist quasi kontinuierlicher Parameter im Eigenwertproblem $\Rightarrow E_n(\vec{k})$ ist quasi-kontinuierliche Funktion

$E_n(\vec{k})$ ist periodisch mit $E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$,
weil beide Eigenwerte zum identischen Gleichungssatz gehören.



Da $E_n(\vec{k})$ periodisch und (quasi)-stetig

Die Eigenwerte $E_n(\vec{k})$ heißen Band und Bandindex n

Bänder können überlappen oder durch Lücken getrennt sein. Die Banddispersion entscheidet über die elektronischen Eigenschaften des FK's.

3.) Analog zu den Phononen, wo $\vec{v}_{\text{pho}} = \nabla_{\vec{k}} \omega(\vec{k})$ ($v_{\text{pho}} = \frac{d\omega}{dk}$; 1D)

ist $\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})$ die Gruppengeschwindigkeit der

Blochelektronen, bzw. eines Wellenpakets aus Zuständen um $E_n(\vec{k})$.

Blochelektronen streuen nicht an Ionenrümpfen.

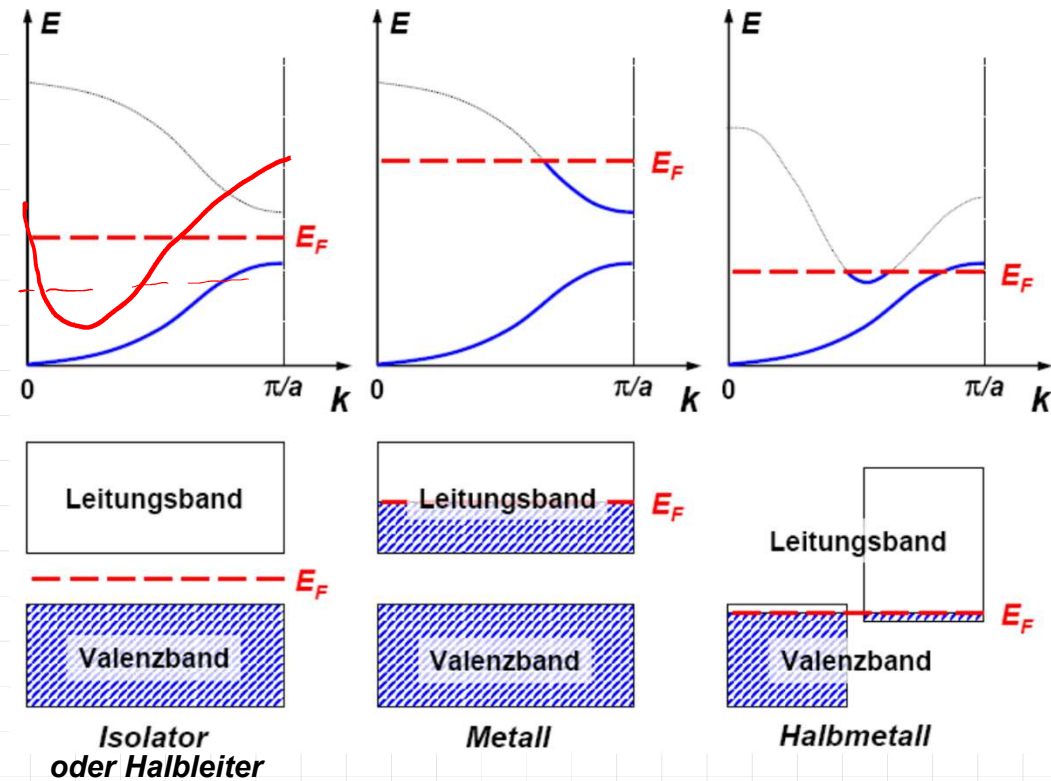
8.2 Metalle, Halbmetalle, Halbleiter und Isolatoren

Die Anzahl der \vec{k} -Vektoren in 1.BZ ist N ($N = \#$ Elementarzellen). Mit

2 Spinzuständen pro Band hat jedes Band $2N$ Zustände bzw. $2e^-$ pro Elementarzelle. Beachte: Energieeigenwerte und damit Bänder können entartet sein.

Fall 1: Einige Bänder sind vollständig gefüllt, andere Bänder sind vollständig leer bei $T = 0$. Notwendige Bedingung für diesen Fall ist eine gerade Anzahl von Valenzelektronen. Ist die

Energielücke $E_g \gg k_B T$ so handelt es sich um einen Isolator ($\sigma \approx 0$ alle T), ist $E_g \gg k_B T$ so dass e^- vom Valenzband ins Leitungsband unterhalb der Schmelztemperatur T_m angeregt werden können, so handelt es sich um einen Halbleiter. E_F liegt im Bereich verbotener Zustände,



zwischen den Bändern. Eine äußere Kraft $\hbar \dot{\vec{k}} = \vec{F}$, die die Bandstruktur nicht zerstört, kann keine e^- beschleunigen, da im vollen Band keine leeren Zustände zur Verfügung stehen und im leeren Band keine e^- (für Halbleiter nur bei $T=0$).

2.) Die Fermienergie liegt innerhalb eines Bandes, das nicht vollständig gefüllt ist (Leitungsband). Wie beim freien e^- -Gas ist die Fläche $E = E_F$ der Fermifläche, die aber nicht mehr unbedingt eine Kugeloberfläche ist. Durch eine äußere Kraft $\hbar \dot{\vec{k}} = \vec{F}$ können e^- in unbesetzte Zustände oberhalb E_F beschleunigt werden. Daraus folgt die elektrische Leitfähigkeit.

Bei Bandüberlappung mit wenig fehlenden e^- im Valenzband und wenig e^- im Leitungsband (insgesamt wenig freie Ladungsträger), ist die Leitfähigkeit gering und man spricht von einem Halbmetall.

- Die Alkalimetalle mit 1 Valenz- e^- sind Metalle.
- Die Erdalkalimetalle könnten Isolatoren sein, besitzen aber Bandüberlappung und sind eher schlechte Metalle.
- Diamant, Si, Ge besitzen 2×4 Valenzelektronen pro Einheitszelle. Die 4 voll besetzten Valenzbänder überlappen nicht mit dem Leitungsband \Rightarrow Diamant ist Isolator, Si, Ge sind Halbleiter.

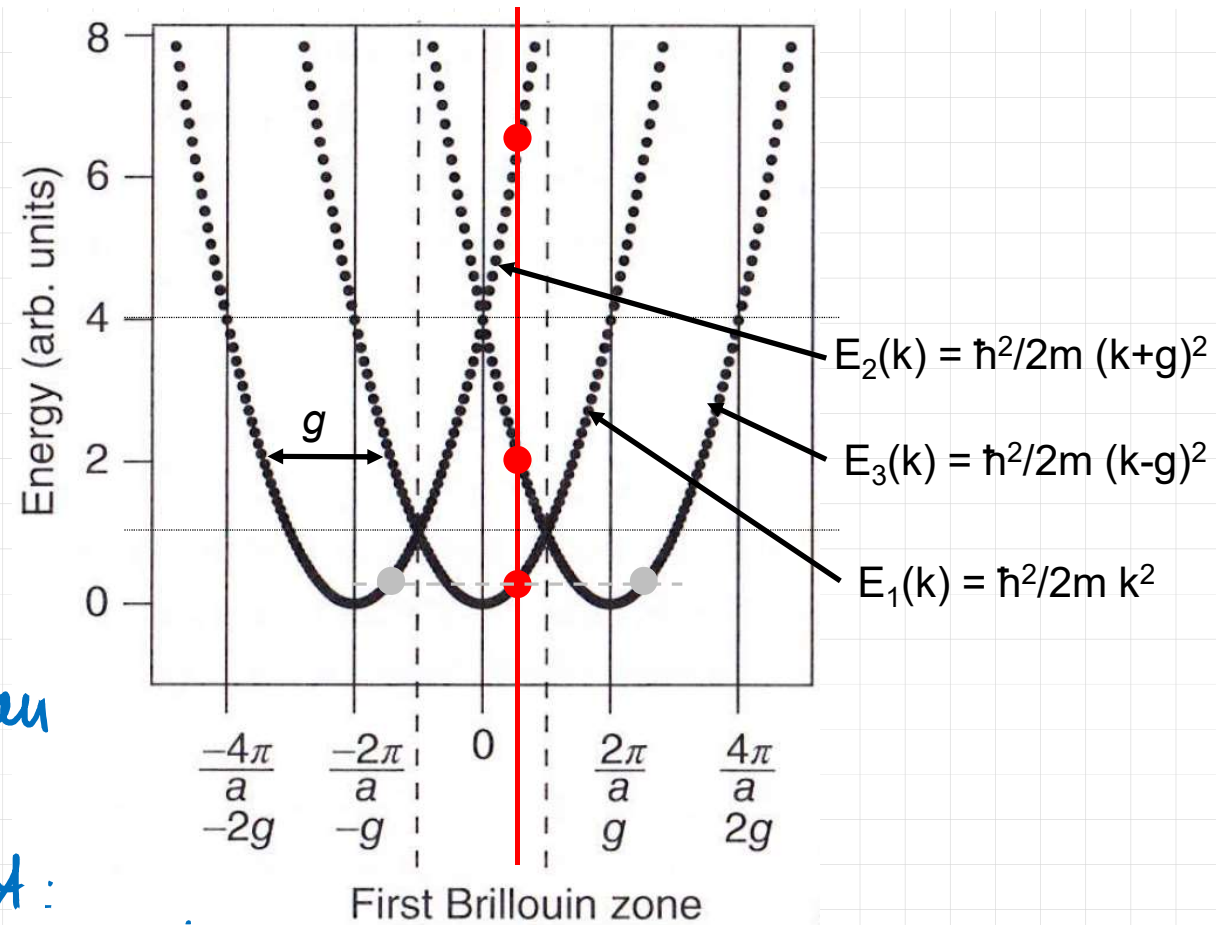
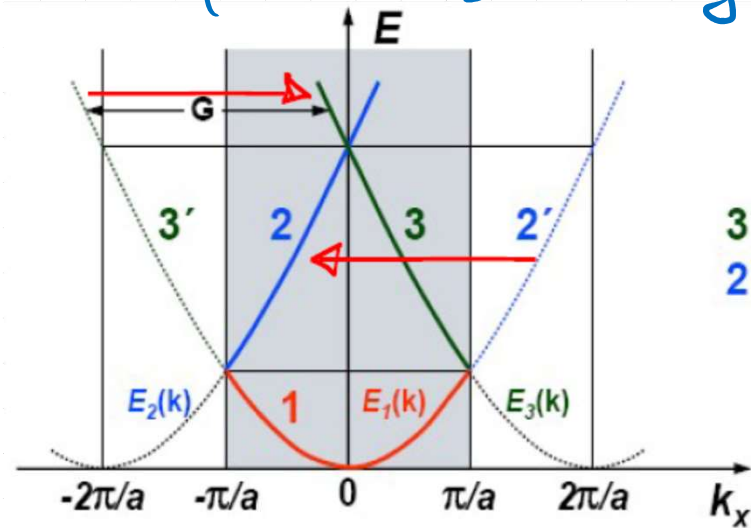
8.3 Zonenschemata

Als simples Beispiel behandeln wir die Dispersionsrelationen von Bloch- e^- für den Grenzfall $U \rightarrow 0$, d.h. freie e^- .

1.) 1D-Fall : $G = \frac{2\pi}{a} \cdot m = g \cdot m$; $m \in \mathbb{Z}$

Die Dispersion ist periodisch $E(k) = E(k+G)$

Hier sind $E(k)$, $E(k+g)$ und $E(k-g)$ dargestellt. Es ist offensichtlich, daß die gesamte Information bereits in der 1. BZ enthalten ist. Es reicht also in der 1. BZ die Segmente 1, 2, 3 darzustellen, denn 2 ist identisch mit Segment 2' von $E(k)$ und 3 mit Segment 3' von $E(k)$.



Man sagt:
Segment 2' wird
zurückgefaltet. Diese Darstellung nur in der
1. BZ heißt reduziertes Zonenschema

$$E_n(k) = E_n(k+G)$$

Wenn alle Dispersionsrelationen dargestellt, spricht man vom periodischen Zonenschema, wird nur eine Dispersionsrelationen auch außerhalb der 1. BZ dargestellt, so spricht man vom ausgedehnten Zonenschema. Alle 3 Darstellungen sind üblich und enthalten die gleiche Information, am wichtigsten ist aber das reduzierte Zonenschema.

