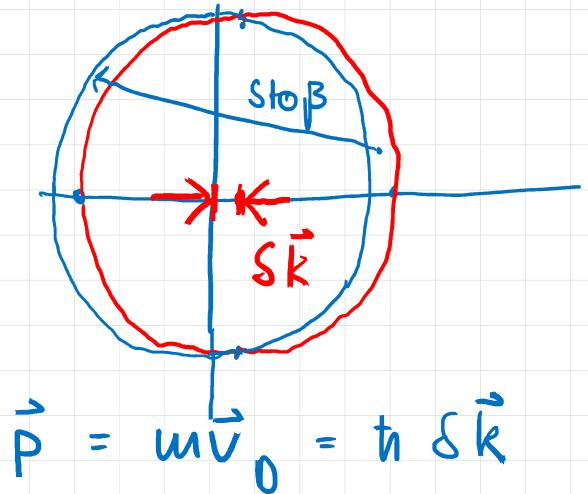


## Relaxationsapproximation

$$\dot{\vec{p}}(t) = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} + \vec{f}(t)$$

$$\dot{\vec{v}_0}(t) = -\frac{\vec{v}_0(t)}{\tau} + \frac{\vec{f}(t)}{m}$$



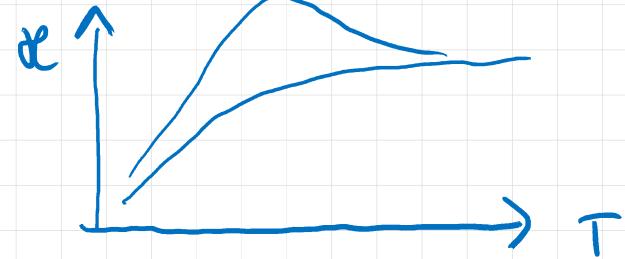
Wiedemann - Franz Gesetz  $L = \frac{\alpha}{\sigma \cdot T} = \text{konsst}$   $L = \text{Lorenzzahl}$

klassisch und quantenmechanisch fast gleiches Ergebnis

$$m \alpha = \frac{1}{2} v^2 \tau \cdot \frac{C_V}{V}$$

$$v_{\text{klass}}^2 \approx 0,01 v_{\text{qm}}^2$$

$$C_{V,\text{klass}} \approx 100 C_{V,\text{qm}}$$



## 7.5 Der Hall-Effekt

$e^-$  der Stromdichte  $j_x$  werden durch Lorentzkraft  $\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}$

in  $y$ -Richtung abgelenkt wenn  $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$

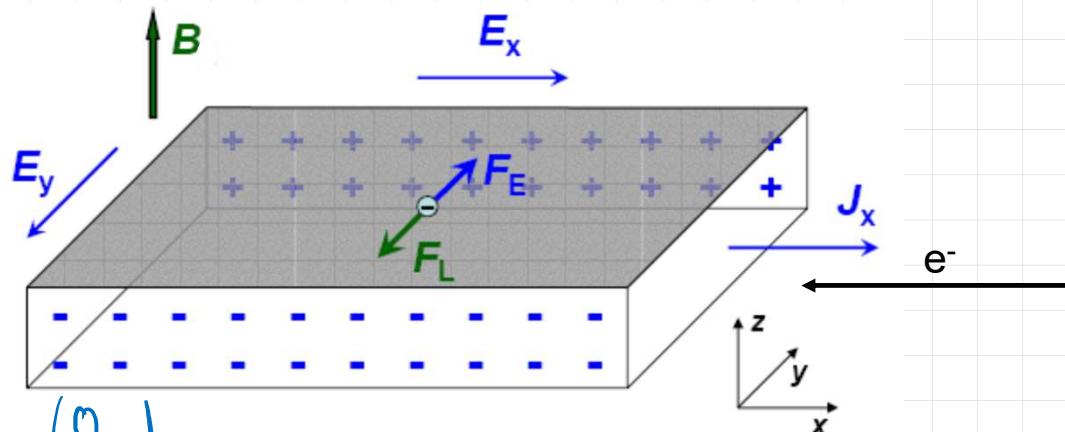
Ablenkung führt zu einem die Ablenkung kompensierenden Feldes  $E_y$

intensivende Größen

$$\rho_{xx}(B) = \frac{E_x}{j_x} \quad \text{Hall: } \rho + \rho(B)$$

$$\boxed{\rho_{xy}(B) = \frac{E_y}{j_x} = B \cdot A_H}$$

$A_H$  heißt Hall-Koeffizient. Berechnung von  $A_H$



$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e \left[ \vec{E} + \frac{\vec{p}}{m} \times \vec{B} \right]$$

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$$

Im stationären Zustand ist  $\frac{d\vec{p}}{dt} = 0 \Rightarrow$

$$0 = -\frac{p_x}{\tau} - e E_x - \omega_c \cdot p_y \quad \left| \cdot \left( -\frac{ue\tau}{m} \right) \right. \quad \omega_c = \frac{eB}{m}$$

$$0 = -\frac{p_y}{\tau} - e E_y + \omega_c p_x$$

$\Leftrightarrow$

$$0 = ue \frac{p_x}{m} + \frac{ue^2\tau}{m} E_x + ue\tau \omega_c \frac{p_y}{m}$$

$$0 = ue \frac{p_y}{m} + \frac{ue^2\tau}{m} E_y - ue\tau \omega_c \frac{p_x}{m}$$

$$\Leftrightarrow \vec{j} = -ue\vec{v}_0 \quad \left| \begin{array}{l} \sigma \cdot E_x = j_x + \tau \omega_c j_y \\ \sigma \cdot E_y = j_y - \tau \omega_c j_x \end{array} \right. \quad \left. \begin{array}{l} (*) \\ \text{Hall-Effekt} \end{array} \right. \quad j_y = 0$$

$$E_y = -\frac{\kappa \omega_c}{\sigma} \cdot j_x = -\frac{m}{ue^2 \gamma} \cdot e \cdot \frac{eB}{m} j_x = \frac{-1}{ue} B \cdot j_x$$

Vergleich mit Definition  $E_y = B \cdot A_H \cdot j_x$

$$\Rightarrow A_H = \boxed{-\frac{1}{ue}}$$

Ergebnisse für Alkalien ganz gut, aber falsches Vorzeichen für Be, Mg, In, Al.

$\Rightarrow$  Verständnis brandet bessere Theorie der  $e^-$

Praktisch: Für bekanntes  $A_H$  und  $U_H = E_y \cdot L$  (Leiterbreite =  $L$ ) ist  $U_H \sim B$   
 $\Rightarrow$  Magnetfeldmessung mit Hallsonde

| Metall | Wertigkeit | $-1/R_h ne$ |
|--------|------------|-------------|
| Li     | 1          | 0,8         |
| Na     | 1          | 1,2         |
| K      | 1          | 1,1         |
| Rb     | 1          | 1,0         |
| Cs     | 1          | 0,9         |
| Cu     | 1          | 1,5         |
| Ag     | 1          | 1,3         |
| Au     | 1          | 1,5         |
| Be     | 2          | -0,2        |
| Mg     | 2          | -0,4        |
| In     | 3          | -0,3        |
| Al     | 3          | -0,3        |

Eine weitere gravierende Abweichung von den Erwartungen beobachtet man in 2D-Elektronengasen in starken  $\vec{B}$ -Feldern. Der Quanten-Hall-Effekt zeigt für

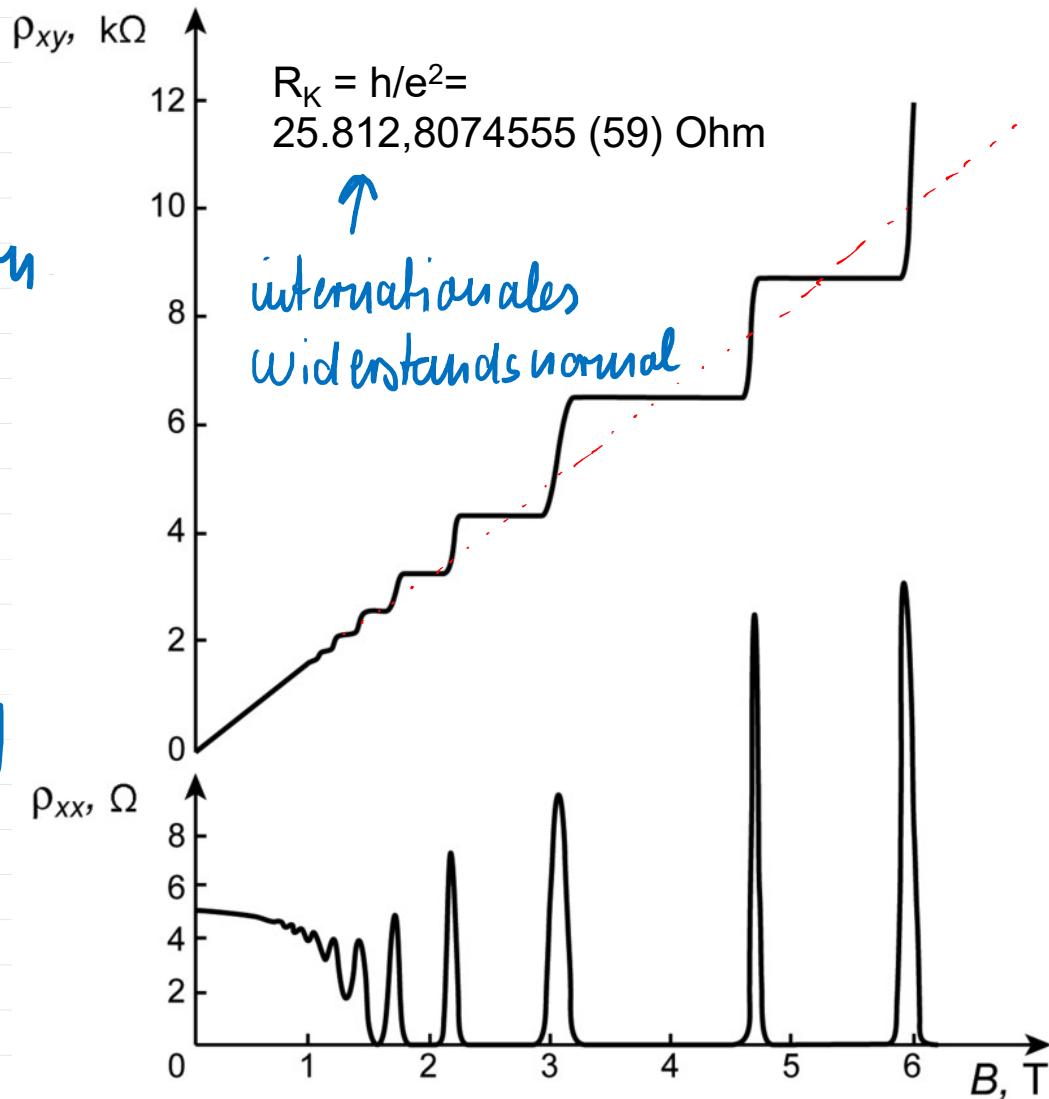
$$R_{xy} = \frac{U_H}{I} = \frac{E_y \cdot L}{J_x \cdot L} = \frac{E_y}{J_x} = \rho_{xy}$$

starke Abweichung vom linearen Anstieg

$$\text{Es wird } R_{xy} = \frac{h}{e^2} = \frac{R_K}{v} \quad v \in \mathbb{N}$$

$R_K$  ist die Klitzing-Konstante.

Auch  $\rho_{xx}$  zeigt unerwartete Oszillationen.



## 8. Energiebänder

Die Theorie des freien  $e^-$ -Gases liefert zwar gute Ergebnisse, aber viele Fragen blieben offen:

- Warum sind Isolatoren transparent?
- Wieso gibt es auch positive Hallkoeffizienten?
- Wieso gibt es so große Unterschiede im spez. elektrischen Widerstand?

6, 20, 12, 4, 8  
16, 14, 23, 1

gutes Metall bei 1K     $10^{-10} \Omega \text{ m}$     }     $\Delta p \approx 10^{32}$   
guter Isolator               $10^{22} \Omega \text{ m}$     }

Gitterkonstante  $\approx 10^{-10} \text{ m}$  -  $\phi$  Milchstraße  $\approx 10^{20}$      $\Delta \approx 10^{30}$

Auflösung opt. Mikroskop  $10^{-7} \text{ m}$  -  $\phi$  Universum  $\approx 10^{25}$      $\Delta \approx 10^{32}$

Verbesserte Beschreibung der  $e^-$  im FK durch Berücksichtigung des Gitters



- geiterperiodesches Potentiel  $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$
  - immer noch unabhängige  $e^-$ ,  $e^-e^-$  WW ist effektiv in  $U(\vec{r})$
  - Dieser Ansatz quasifreier  $e^-$  führt zur Bildung von Energiebändern (erlaubte Energien der  $e^-$ ) und Energiefüllzonen (verbotene Energien der  $e^-$ )
- Der Ansatz quasigebundener  $e^-$  führt eben falls zu Bändern (hier nur kann)

Bei der Bildung 2er Na - Atome  
 bilden sich bindende und anti-  
 bindende Molekülorbitale (analog  $H_2$ )  
 Bringt man viele Na - Atome  
 zusammen, so entsteht ein  
 Quasi kontinuum von Zuständen,  
 von denen die Hälfte besetzt ist  
 Die  $e^-$  in diesen Zuständen  
 sind delokalisiert (itinerant).  
 Durch ein äußeres Feld können  
 $e^-$  an Oberfläche der besetzten  
 Zustände beschleunigt werden,  
 Na ist ein Metall

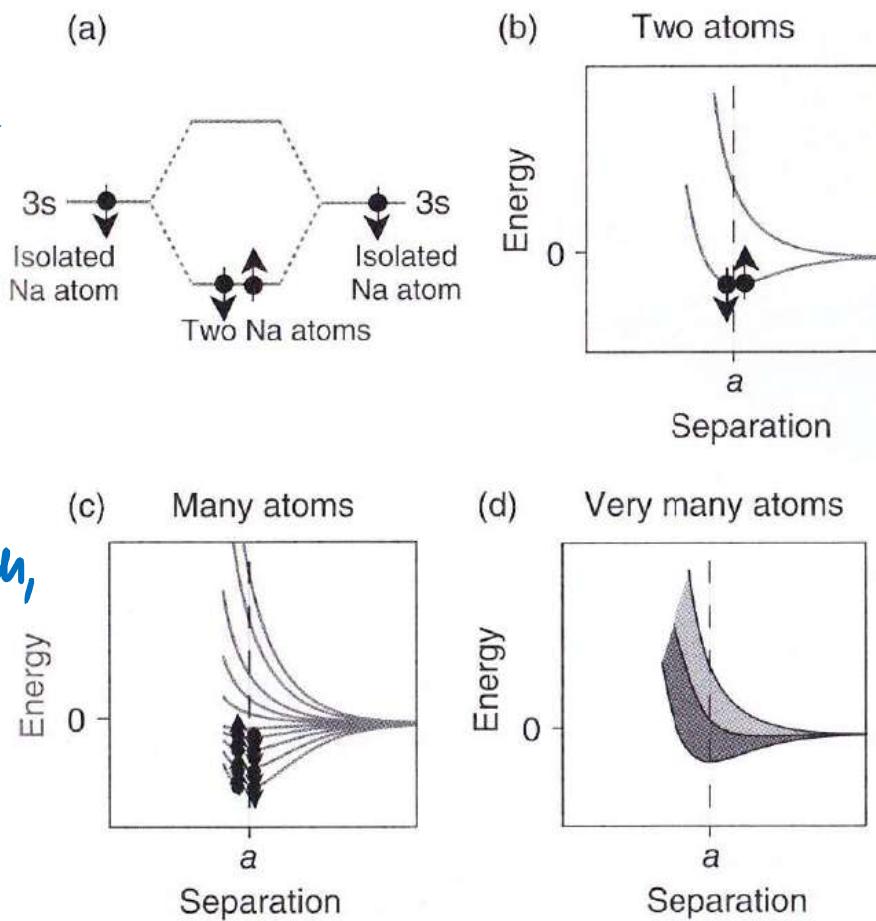


Figure 6.1 The formation of energy bands in solids. (a) Bonding and antibonding energy levels and their occupation for a molecule constructed from two Na atoms. The black dots and arrows symbolize the electrons with their spin. (b) The molecule's energy levels as a function of interatomic

separation. (c) The energy levels for a cluster of many Na atoms as a function of their separation. (d) For very many atoms, there is a quasi-continuum between the lowest and highest energy levels. This energy band is half-filled with electrons (dark area) and half-empty (bright area).

Außerdem ist dies beim Diamant.  
Bei Annäherung der C-Atome  
bilden sich aus den zwei  $3s$   
und zwei  $3p$  Valenzelektronen  
durch Hybridisierung bindende  
und antibindende  $sp^3$  Hybrid-  
orbitale die im vollständig  
besetzten und vollständig  
leeren Bändern verstreiten.

Zwischen diesen Bändern bildet sich eine Energiehöhle aus. Ein äußeres  
 $E$ -Feld kann die Energie der  $e^-$  an der Oberfläche des besetzten  
Bandes nicht erhöhen, denn es gibt keine freien Zustände.  
Deshalb ist Diamant ein Isolator.

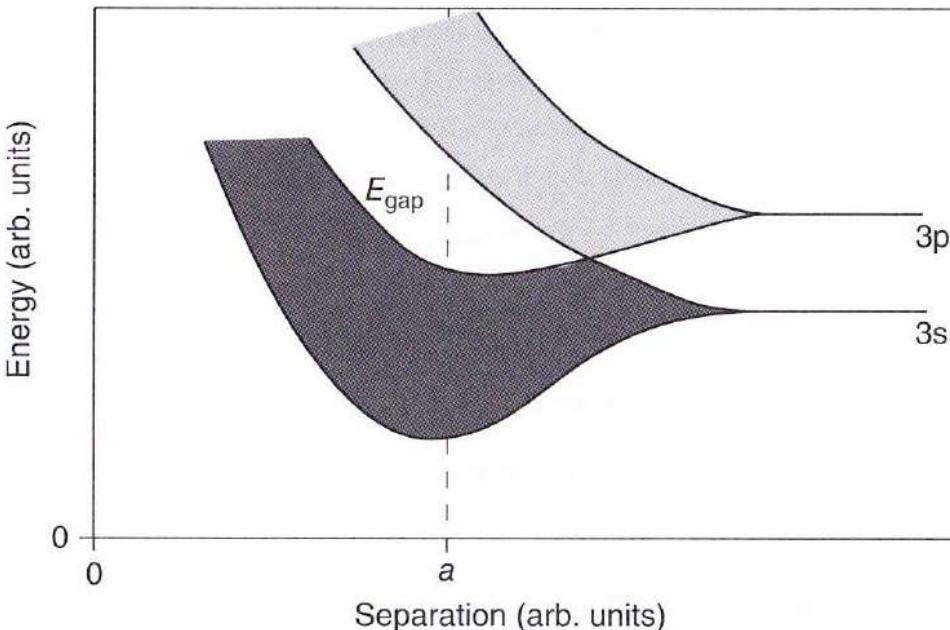


Figure 6.2 Band formation in Si. The lower band corresponds to the  $sp^3$  states and is completely filled.

Wir unterscheiden Materialien nach der Größe ihrer Energulücke:

Isolator  $E_{\text{gap}} > 2 \text{ eV}$  keine Leitung bis zum Schmelzen

Halbleiter  $E_{\text{gap}} < 2 \text{ eV}$  keine Leitung bei 300 K, aber Leitung vor Schmelzen

Experiment: Temperaturabhängigkeit des Widerstands von Halbleitern und Metallen

### 8.1 Bloch Elektronen

$e^-$  bewegen sich in periodischem Potential  $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$ ;  $\vec{R} = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3$

Die Schrödinger-Gleichung

$$H \Psi(\vec{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

hat dann Eigenzustände der Form

$$(*) \quad \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

wo

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

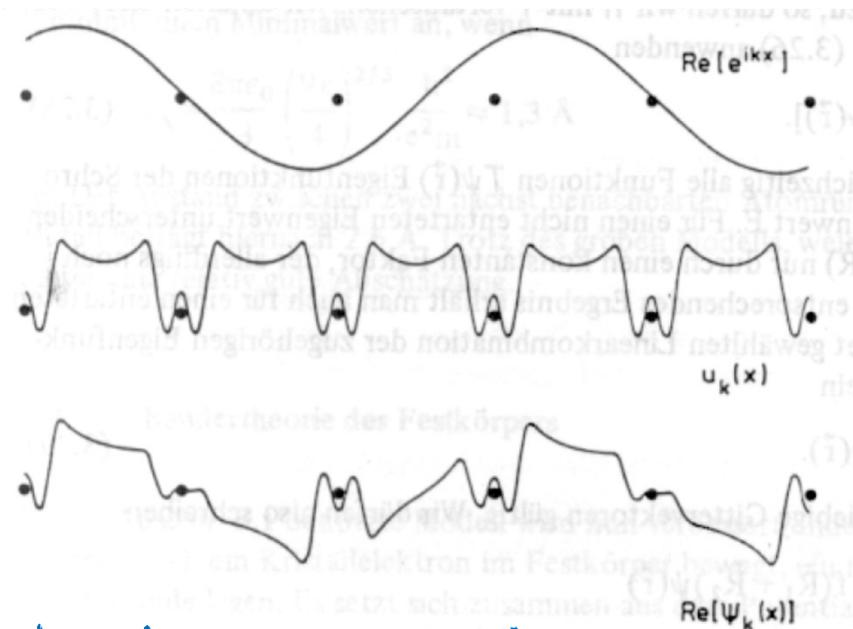
Bloch Theorem  
für alle  $\vec{R}$

$\vec{k} \hat{=} \text{Wellenvektorindex}$

$n \hat{=} \text{Bandindex}$

(\*) ist Produkt aus ebener Welle und gilt er periodischer Funktion.

- $e^-$  ist über ganzen Kristall ausgedehnt, in jeder Zelle gleich wahrscheinlich
- $\Psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \cdot \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \hat{=} \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$  ist guter-periodisch
- Das periodische Potential ist in Wellenfunktion eingebaut, also keine Streuung der  $e^-$  an perfekten Gitter.



## Äquivalente Formulierung des Bloch-Theorems

$$\boxed{\Psi_{u\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \cdot \Psi_{u\vec{k}}(\vec{r})} \quad \text{für alle } \vec{R}$$

Beweis  $\Psi_{u\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot e^{i\vec{k}\vec{R}} \cdot \Psi_{u\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \cdot \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot \Psi_{u\vec{k}}(\vec{r})}_{\Psi_{u\vec{k}}(\vec{r})}$

Periodische Randbedingungen:  $\Psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \Psi(\vec{r})$

mit  $N_i \vec{a}_i = L_i$  erzwingen wieder Quantisierung der  $\vec{k}$ -Werte

mit dem Bloch-Theorem ist  $\Psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = e^{i\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i} \cdot \Psi(\vec{r})$

$$\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i = 2\pi m_i = \vec{a}_i \cdot \vec{b}_i m_i$$

$$\text{Also } \vec{k}_i = \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i \quad \text{und} \quad \vec{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i$$

Für den einfach kubischen Fall ist  $b_i = \frac{2R}{a}$ ,  $a$  = Gitterparameter, und damit das  $k$ -Raumvolumen  $\Omega_k = \frac{(2R)^3}{V}$  sowie  $z(\vec{k}) = 2 \frac{V}{(2R)^3}$   
 wie beim freien  $e^-$ -Gas. [Relaxationen gelten für beliebige Gitter]

### Beweisidee des Bloch theorems:

Wellenfunktion als Fourierreihe

Potential als Fourierreihe  
 (U ist gitterperiodisch  $\Rightarrow \vec{k} = \vec{G}$ )

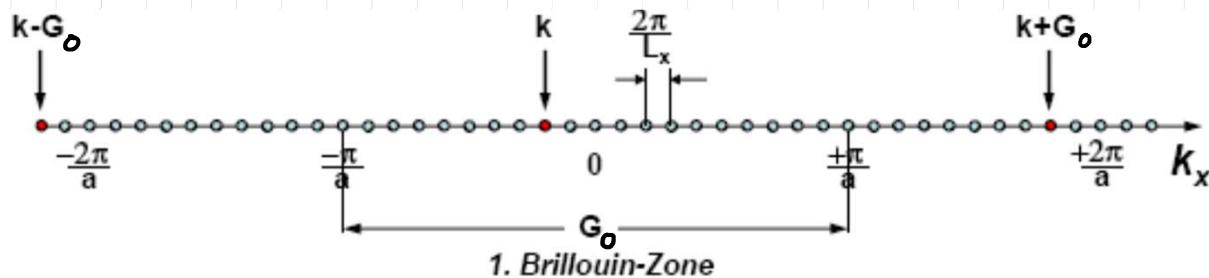
$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i \vec{k} \vec{r}} \cdot \vec{k} = \sum \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i$$

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i \vec{G} \vec{r}}$$

Einsetzen in Schrödinger-Gleichung liefert:

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

Hauptgleichung



- Gleichungen koppeln nur Koeffizienten  $c_{\vec{k}}$ ,  $c_{\vec{k} + \vec{G}_0}$ ,  $c_{\vec{k} - \vec{G}_0}$
- Also jeder Satz Gleichungen durch  $\vec{k} \in 1. \text{ BZ}$  eindeutig charakterisierbar
- Energie eigenwerte  $E_{n\vec{k}}$  mit Koeffizientensatz  $c_{\vec{k}}$ ,  $c_{\vec{k} + \vec{G}_0}$ ,  $c_{\vec{k} - \vec{G}_0}$
- Energie eigenwerte in  $\vec{k}$  werden sortiert  $E_{1\vec{k}} \leq E_{2\vec{k}} \leq E_{3\vec{k}} \dots$

• Eigenfunktionen  $\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{n\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G}) \cdot \vec{r}}$   
 mit Bandindex  $n$  und Wellenzvektor  $\vec{k} \in BZ$

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \sum_{\vec{G}} c_{n\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

$u_{n\vec{k}}$  sind tatsächlich gitterperiodisch:

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_{\vec{G}} c_{n\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}(\vec{r} + \vec{R})} = \underbrace{e^{-i\vec{G}\vec{R}}}_{=1} \sum_{\vec{G}} c_{n\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

Also sind die Eigenfunktionen tatsächlich von der Form,  
 das Bloch-Theorem fordert