

Contents

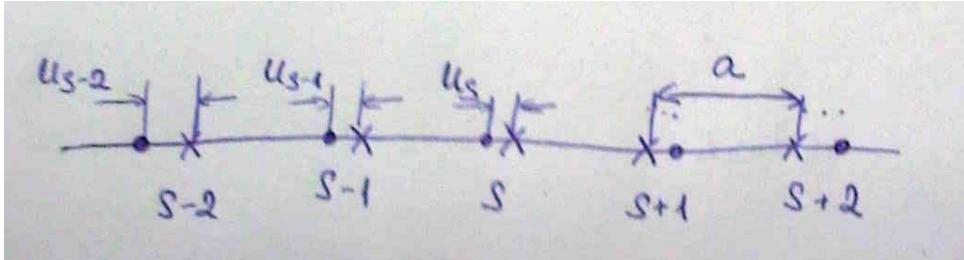
6 Gitterdynamik und Phononen	2
6.1 Gitterschwingungen	2
6.2 Gitter mit 2-Atomiger Basis	4
6.3 Quanntisierung elastischer Wellen	5
6.4 Zustandsdichte der Phononen	7
6.5 Spezifische Wärme	8
6.6 Debye-Näherung	9
6.7 Anharmonische Effekte	10
6.7.1 Thermische Ausdehnung	11
6.7.2 Wärmeleitfähigkeit	12
6.8 Klassisches Drude Modell	12
6.8.1 Impuls Relaxation	14
6.8.2 Wechselstromleitfähigkeit	16
6.9 Sommerfeld-Theorie der Metalle	18
6.9.1 Spezifische Wärme	21
6.10 Energiebänder	22
6.11 Tight-binding Model	27

Chapter 6

Gitterdynamik und Phononen

6.1 Gitterschwingungen

1D Kette mit einatomiger Basis.



Bewegungsgleichungen:

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (u_{s+n} - u_s)$$

mit c_n als Kraftkonstante

Lösung: $u_{s+n} = v e^{-i\omega t + i g n a}$

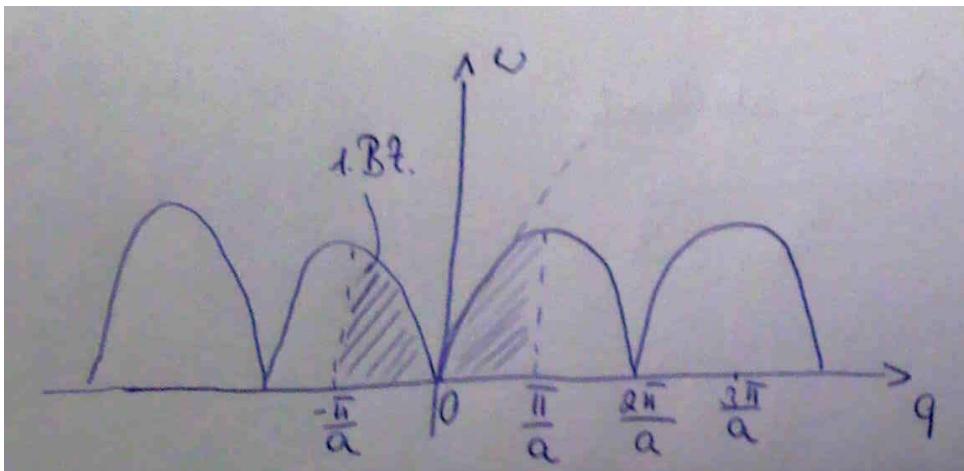
$$\omega^2 M = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (1 - e^{iqna})$$

nach Symmetrie $c_{-n} = c_n$

$$\omega^2 = \frac{1}{M} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (2 - e^{iqna} - e^{-iqna}) = \frac{2}{M} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (2 - \cos(qna))$$

$c_1 \gg c_n$, für $n \geq 2$, nur nächst. Nachbarn $\rightarrow \omega^2 = \frac{2c_1}{M} (1 - \cos(qa)) = \frac{4c_1}{M} (\sin^2(\frac{qa}{2}))$

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{c_1}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$



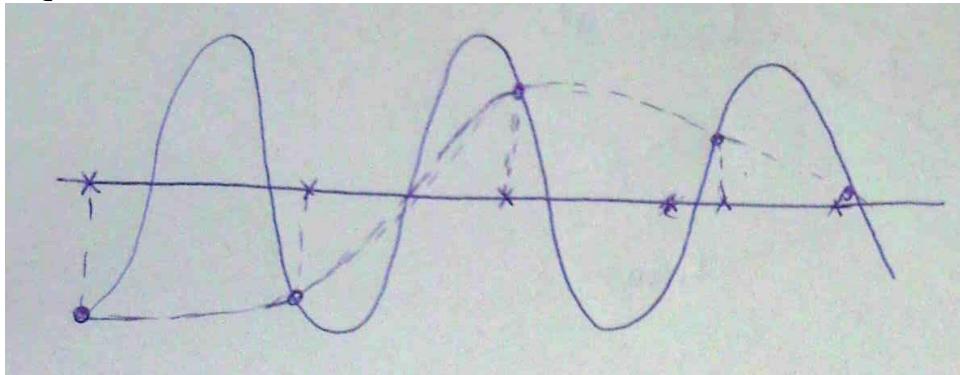
$$\text{bei } c_2 \neq 0; \omega^2 = \frac{4c_1}{M} \left[\sin^2 \frac{qa}{2} + \frac{c_2}{c_1} \sin^2(qa) \right]$$

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = e^{iqa} \rightarrow \text{Phasenunterschied}$$

Wir betrachten den Bereich $-\pi < qa < \pi$. Reduktion auf die 1. Brillouin-Zone;

$$\underbrace{q'}_{\text{außerhalb 1 BZ}} = \underbrace{q}_{1 \text{ BZ}} + \underbrace{\frac{2\pi N}{a}}_{\text{mit}}$$

$N \in \mathbb{Z}$



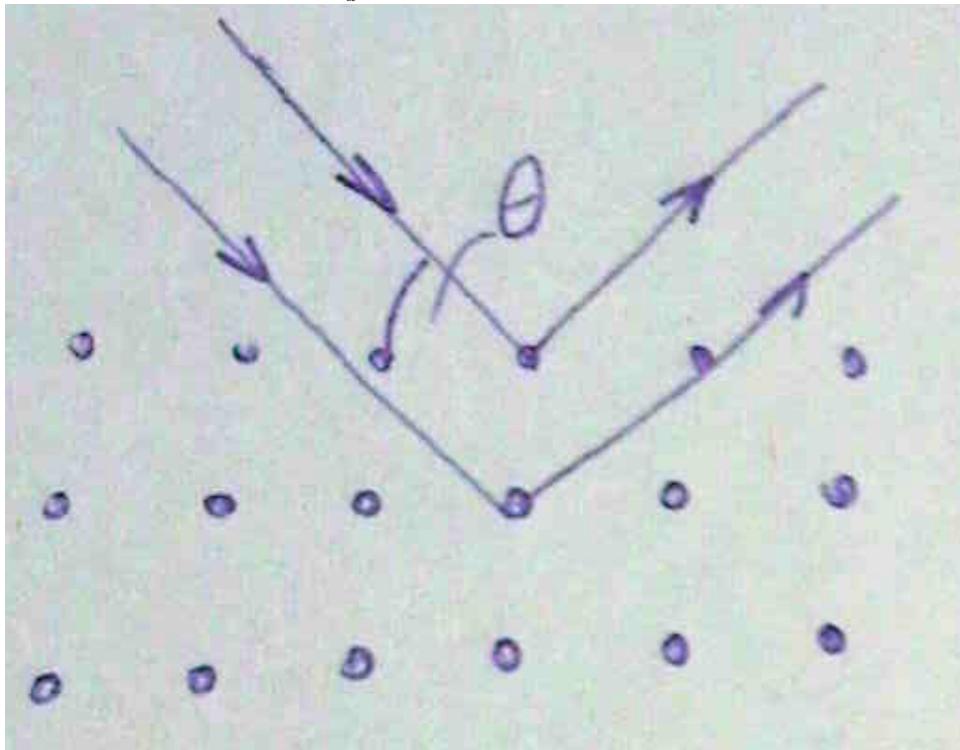
$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = e^{iqa} \cdot e^{2\pi N}$$

- Gruppengeschwindigkeit: $v_g = \frac{d\omega}{dq}$ (entspricht den Energietransport) ($v_g = 0$ eine Stehende Welle, Schwingung in Gegenphase, kein Energietransport)
- Phasengeschwindigkeit: $v_{Ph} = \frac{\omega}{q}$
- Langwelliger Grenzfall: $q \rightarrow 0; \lambda \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2}{M} \sum_{n=1}^{\infty} c_n (1 - \underbrace{\cos(qna)}_{\approx 1 - \frac{x^2}{2} + \dots}) \approx \frac{q^2 a^2}{M} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 s_n \end{aligned}$$

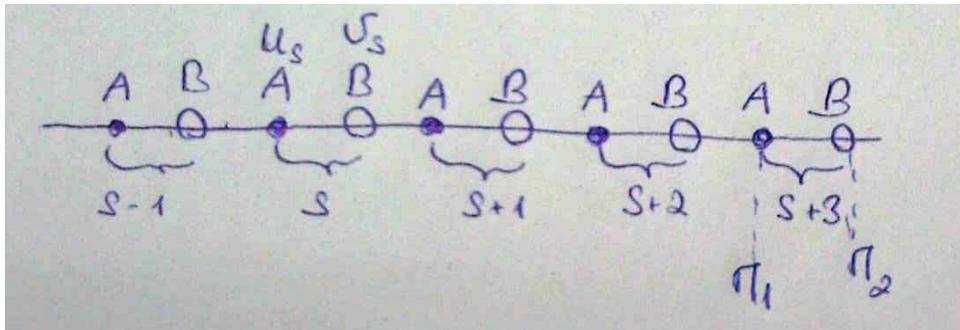
$$c_{11} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2}{a} c_n^2$$

kurzwelliger Grenzfall: $|q| \approx \frac{\pi}{a}; \lambda = 2a$



$$2ds \sin \theta = \lambda; d = a; \theta = \frac{\pi}{2}$$

6.2 Gitter mit 2-Atomiger Basis



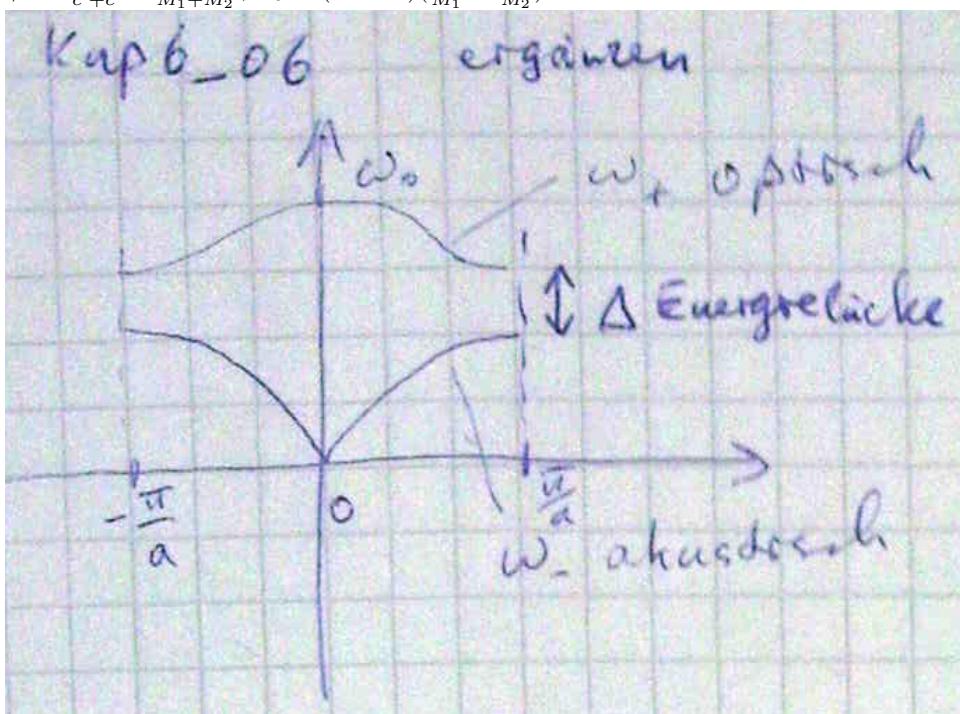
$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c'(v_s - u_s) - c''(u_s - v_{s-1})$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = c''(v_{s+1} - v_s) - c'(v_s - u_s)$$

Lösung $u_s = ue^{-i\omega t + iqsa}$; $v_s = ve^{-i\omega t + iqsa}$

$\det|...| = 0$; Eigenfrequenzen: $\omega_{\pm}^2 = \frac{\omega_0^2}{2} [1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}}]$

$$\gamma = e^{\frac{\sqrt{c'c''}}{c'+c''}} \cdot \frac{\sqrt{M_1 M_2}}{M_1 + M_2}; \omega_0 = (c' + c'') \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)$$



a) Für $q \rightarrow 0$; $\omega_0 = \frac{2C}{\mu}$; $c = c' = c''$; $\mu^{-1} = \mu_1^{-1} + \mu_2^{-1}$

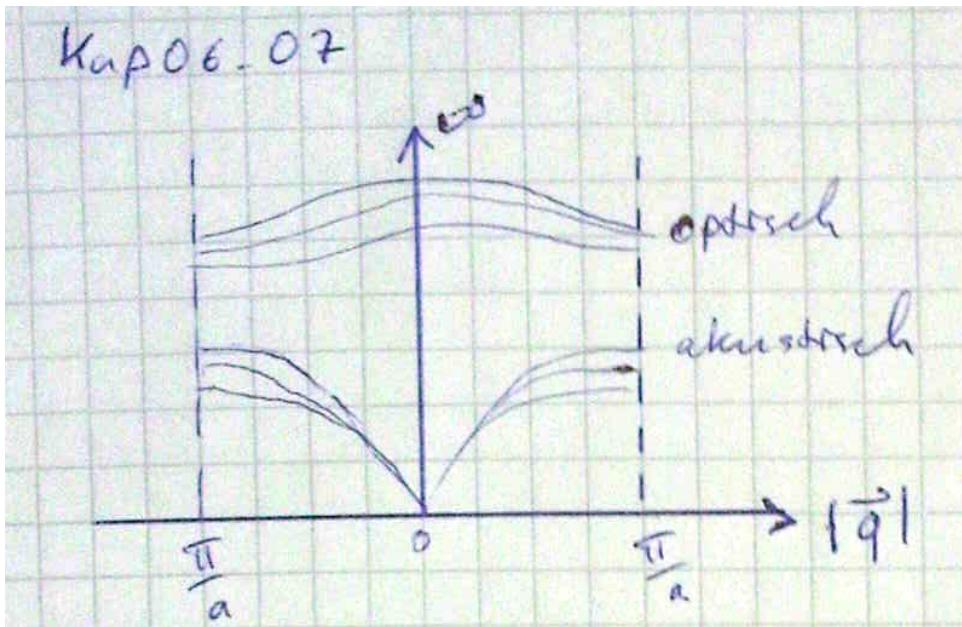
$\frac{u}{v} = -\frac{\mu_2}{\mu_1}$: Schwingung in Gegenphase; Ionenkristalle: oszillierendes elektrisches Dipolmoment

b) Für $|q| \rightarrow \frac{\pi}{a}$; $M_1 < M_2$; $\omega^2 = \frac{2c}{M_1}$; $\omega^2 = \frac{2c}{M_2} \Rightarrow \frac{v}{u} = 0$ bzw $\frac{u}{v} = 0$

Frequenzlücke → 'verbotene' Zone

3D Kristalle (mit P Atomen pro E.Z.)

- Es gibt 3 akustische Zweige mit 1 longitudinale und 2 transversale
- (3P-3) optische Zweige



6.3 Quantisierung elastischer Wellen

List (EM-Feld) → Photonen → Teilchen Schall (elastisches Feld) → Phononen → Quasiteilchen

Quasiimpuls: $\hbar\vec{q}$ Energie: $E_{\vec{q}} = \hbar\omega_{\vec{q}}$

Quasiimpuls und seine Energie ist definiert nur in der 1.B.Z.

$$E_{\vec{q}} = \hbar(n_{\vec{q}} + \frac{1}{2})\omega_{\vec{q}}$$

Die Eigenwerte sind quantisiert

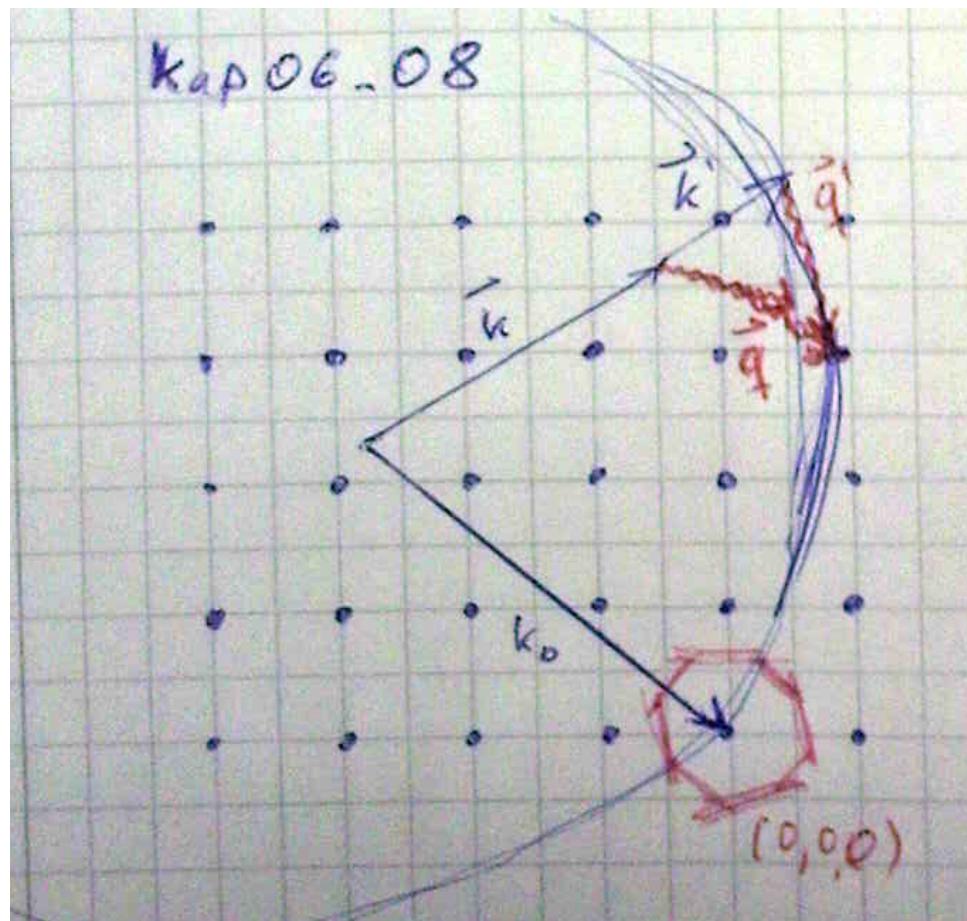
$\frac{1}{2}\hbar\omega_{\vec{q}}$ ist die Nulpunktenergie des Schwingungszustandes

Energieverluste (inelast. Streuung)

Die Energieverluste könnten wir entweder klassisch (komplexe ω, k . Damit entspricht der Imaginäre-Teil den Verlusten.

Oder die Energieverluste werden quantenmechanisch beschrieben (die Zahl der Teilchen ist reduziert). Inelastische Streuung durch Phononen representiert.

Impuls $\underbrace{\vec{k}_0}_{\text{Photon}} + \underbrace{\vec{B}}_{\text{ein Vektor des reziproken Gitters}} = \vec{k} \pm \underbrace{\vec{q}}_{\text{Phonon mit Wellenvektor } \vec{q}} ; \text{ Energie } \hbar\omega_0 = \hbar\omega \pm \hbar\omega_q$



Ewald Konstruktion

\oplus ein Phonon erzeugt \ominus ein Phonon absorbiert
Wiederholung mögliche Streuteilchen (Messsonden)

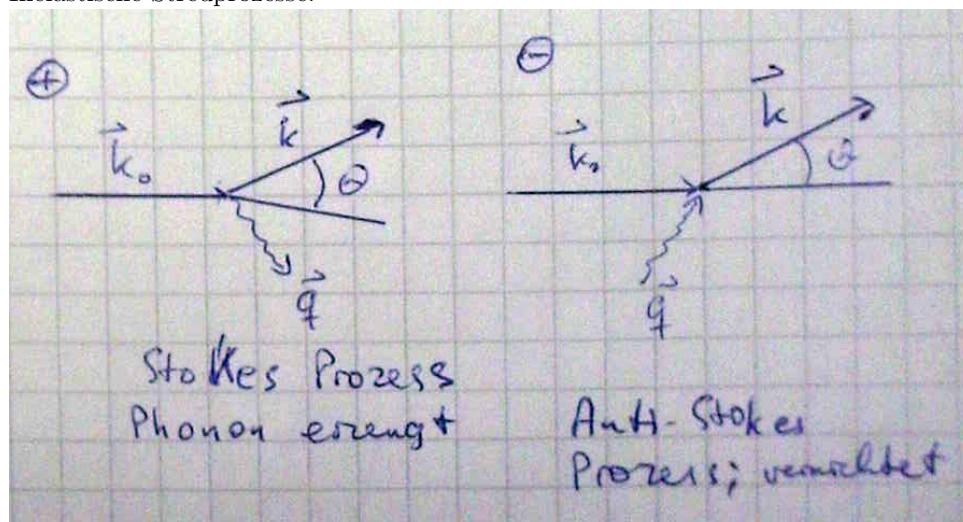
- Röntgen-Photonen: $E \approx 10 \text{ keV}$; ! Phononen: $E_g \approx 10^{-2} \text{ eV}$
- Elektronen: $E \approx 100 \text{ eV}$; Nachteil die Eindringtiefe ist gering
- Neutronen: $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \approx 0,1 \text{ eV}$; können durch den ganzen Körper praktisch ungehindert durchfliegen; können mit Phononen interagieren (inelastische Streuung).

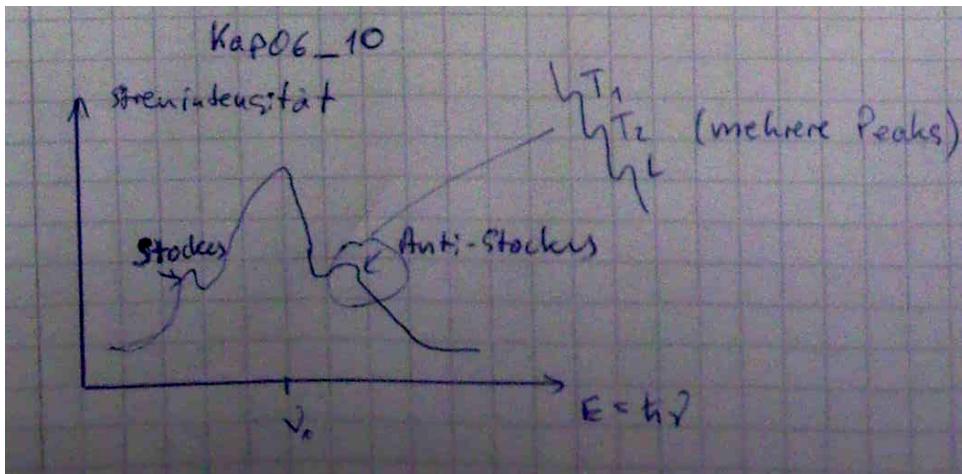
Lichtstreuung: sichtbares Licht mit $\lambda_\nu \gg a$; $|\vec{k}_0| \ll |\vec{B}| \approx \frac{2\pi}{a}$, nur 1.B.Z.

Impulserhaltung: $\vec{k}_0 = \vec{k} \pm \vec{q}$

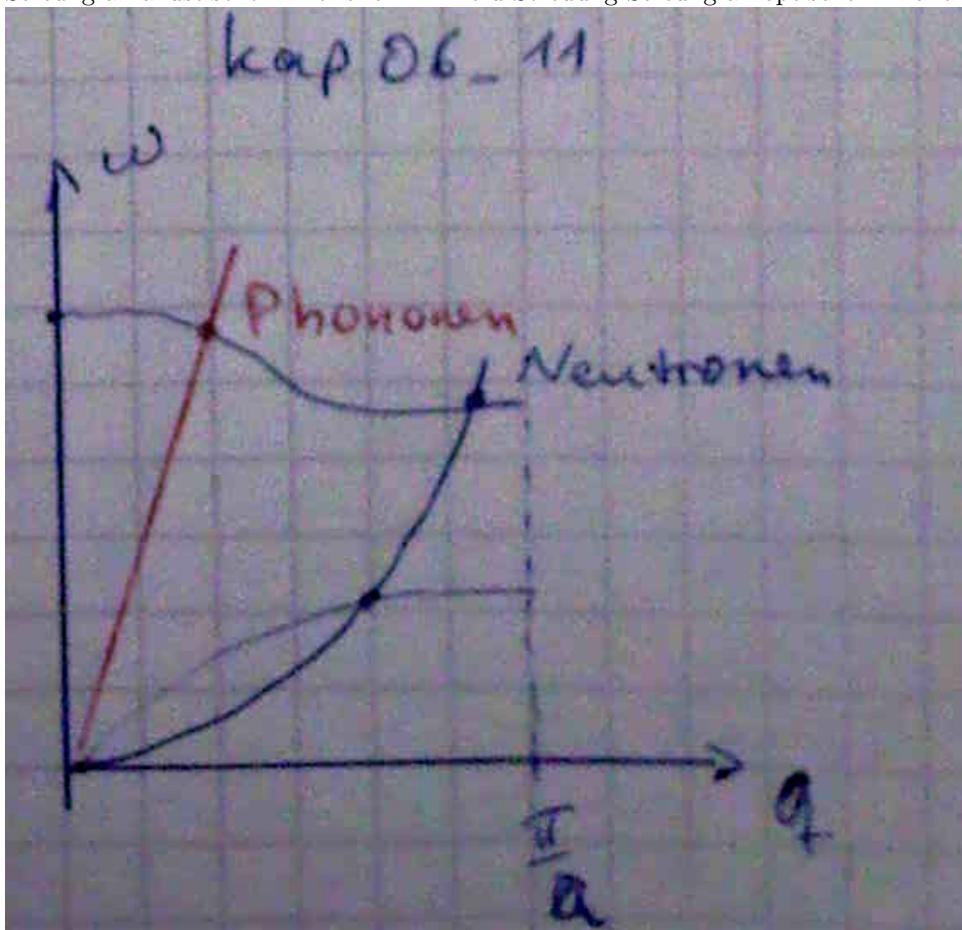
Elastische Streuung: Rayleigh-Streuung $\vec{k} = \vec{k}_0$; $\vec{q} = 0$

Inelastische Streuprozesse:





Streuung an akustischen Phononen: Brilloiu-Streuung Streuung an optischen Phononen: Raman Streuung



6.4 Zustandsdichte der Phononen

Theorie eines 3D-Kristalls vorgeschlagen von Born-Karman, 1912 (klassische Theorie)

$$\vec{u}(x, y, z) = \vec{u}(x + L_x, y + L_y, z + L_z); \text{ periodische Randbedingung}$$

$$\text{Wellen (Moden): } \vec{u} = \vec{u}_0 \exp[-i(\omega t - q_x x - q_y y - q_z z)]$$

Periodizität der Atomaren Auslenkung bei $q_\alpha = m_\alpha \frac{2\pi}{L_\alpha}$; $\alpha = x, y, z$ und m_α ganzzahlige Quantenzahl.

$$e^{iq_\alpha L_\alpha} = 1$$

bei einem Kristall mit N_α Elementarzellen (E.Z.) in α -Richtung haben wir insgesamt $N_x, N_y, N_z = N$ E.Z. 3N Lösungen der Bewegungsgleichung; mit p Atome pro E.Z. gibt es $3pN$ Lösungen der Bewegungsgleichung.

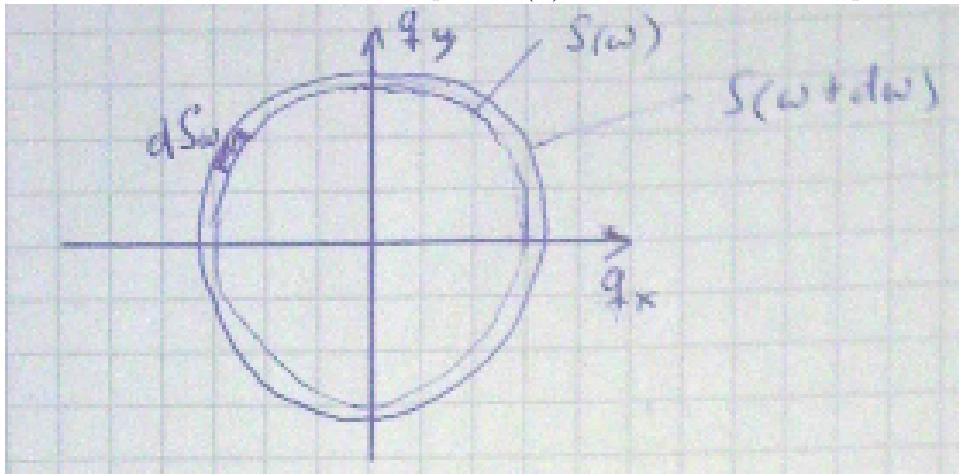
Alle erlaubten wellenvektoren liegen in 1.Brillouin-Zone (1.B.Z.)

'Dichte' $D(q) \equiv \rho_q$ im reziproken Raum:

$$\rho_q = \frac{N}{(2\pi)^3/V_z} = \frac{NV_z}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

V_z -Das Volumen der E.Z. des realen Gitters.

Zustandsdichte als Funktion der Frequenz $D(\omega)$: Anzahl von Zuständen pro Einheitsintervall der Frequenz ω



$$D(\omega) \cdot d\omega = \rho_q \int_{\omega}^{\omega+d\omega} d^3q = \rho_q \int_{\omega}^{\omega+d\omega} dS_{\omega} \cdot dq_{\perp}$$

$$\text{Gruppengeschwindigkeit: } v_g = \left| \frac{d\omega}{d\vec{q}} \right| = \left| \underbrace{\text{grad}_{\vec{q}}\omega}_{\equiv \nabla_{\vec{q}}\omega} \right| = \frac{d\omega}{dq_{\perp}}$$

$$D(\omega) \cdot d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{Schalde}\omega=\text{const}} \frac{dS_{\omega}}{v_g} \cdot d\omega$$

Für isotrope Kristalle:

$$D(\omega) \cdot d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} d\omega \frac{4\pi q^2}{v_g} = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{q^2}{v_g} d\omega$$

Die Zustandsdichte ist um so größer, je flacher die $\omega(\vec{q})$ verläuft. Kritische Punkte → van-Hove-Singularitäten ($v_g \rightarrow 0$). Häufigstes vorkommen von Zuständen.

$$3D: D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{q^2}{v_g}; 2D: D(\omega) = \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{2\pi q^2}{v_g} = \frac{Ag}{2\pi v_g} \quad 1D: D_1(\omega) = \frac{L}{2\pi} \frac{2}{v_g} = \frac{L}{\pi v_g}$$

6.5 Spezifische Wärme

$$c = c_{Ges} \frac{N_A}{N}; N_A = 6,022 \cdot 10^{23}; N \text{ Elementarzellen E.Z.}$$

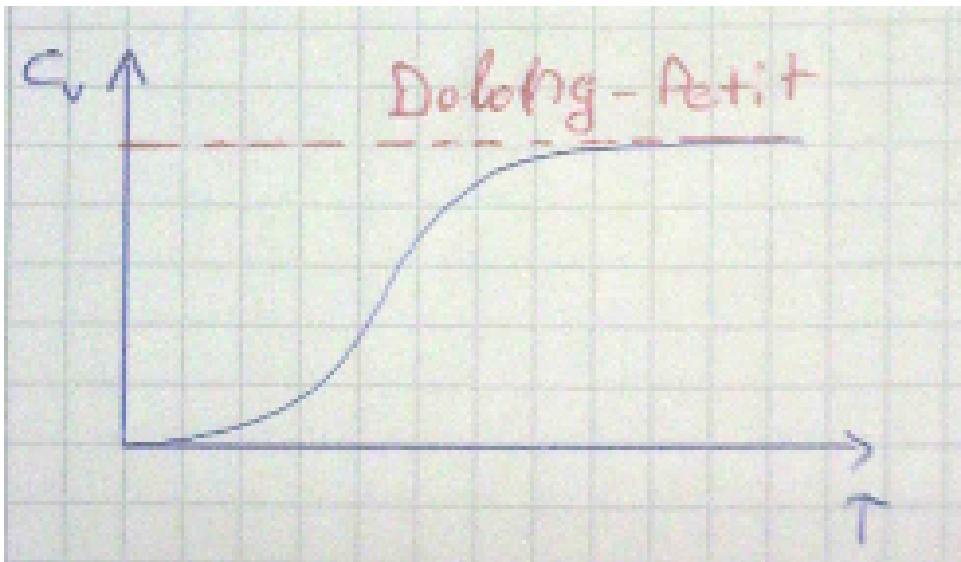
$$c|_{P=const.} c_p > c|_{V=const.} = c_V; \text{ Unterschied zwischen } c_p \text{ und } c_V \text{ ist in der Realität minimal.}$$

Klassische Theorie: $c_V = \frac{\partial}{\partial T} U(T); U$ -innere Energie. Therm. Mittelwert der Energiewerte: $U \equiv \langle E \rangle = \sum_i p_i \cdot E_i$; p_i -Wahrscheinlichkeit. Klassisch:

$$\langle E \rangle = \frac{\int E e^{-\frac{E}{k_B T}} d\Gamma}{\int e^{-\frac{E}{k_B T}} d\Gamma}$$

$$d\Gamma = dx \cdot dy \cdot dz \text{-Phasenraum}$$

harmonischer Oszillator: $\langle E_{Osz} \rangle = k_B T$ 3pN Gitterschwingungen: $c_V = 3pNk_B$ Dulong-Petit-Gesetz (1819)



$$c_V = 3R = 3 \cdot 8,3 \frac{J}{mol \cdot K} = 24,9 \frac{J}{mol \cdot K} = const.; R\text{-univers. Gaskonstante}$$

Quantentheorie: Erste Erklärungsversuch von Einstein (1906) und zweiter und besserer Versuch von Debye (1912).

Zustand n mit $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$; Boltzmann-Verteilung:

$$p_k = \frac{e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{k_B T}}} = e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right]$$

$$\text{Nenner} = e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \right]^n = e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right]^{-1}; \text{mit } \sum_0^{\infty} x^n = \frac{1-x^{n+1}}{1-x} \approx \frac{1}{1-x}; n \rightarrow \infty, x \rightarrow 0$$

$$U \equiv \langle E_n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} p_n \cdot E_n = \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right] \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) \underbrace{\left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right]}_x^n$$

$$\sum_n x^n n = x \frac{d}{dx} \sum_n x^n = \frac{x}{(1-x)^2}$$

$$\langle E_n \rangle = \hbar\omega \left[\frac{1}{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} + \frac{1}{2} \right]$$

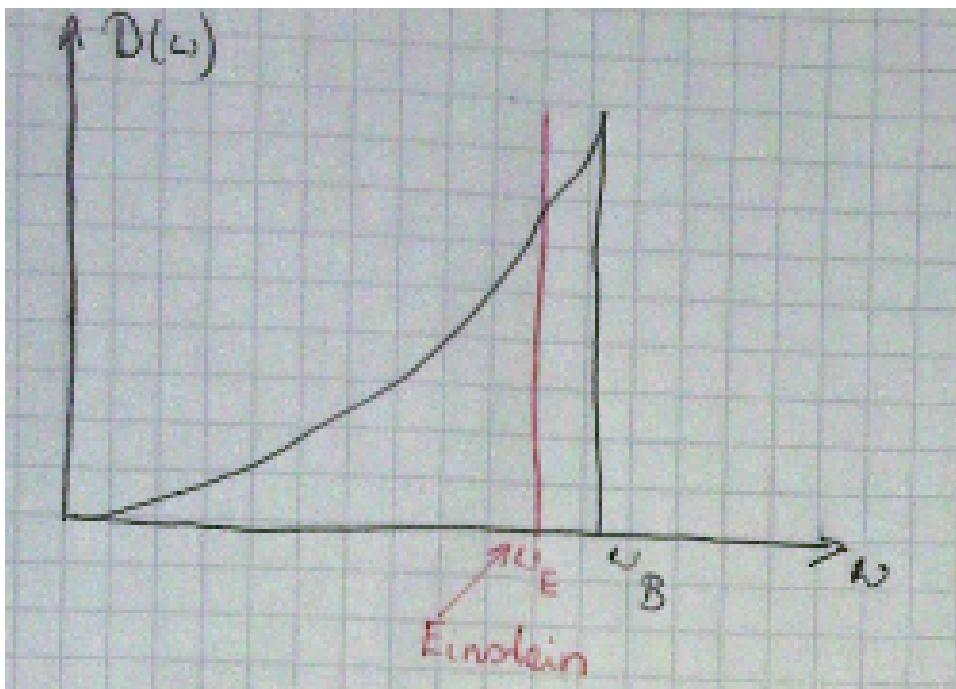
$$\text{mit } E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \\ \langle n \rangle \frac{1}{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}; \text{ Bose-Einstein Faktor; } E(\omega, T) = \hbar\omega[\langle n \rangle + \frac{1}{2}]$$

6.6 Debye-Näherung

Debye-Näherung kann man für isotrope Festkörper anwenden mit $p = 1 \Rightarrow \omega = v_g; v = v_g$. Betrachte nur akustische Phononen.

$$D(\omega) \cdot d\omega = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{\omega^2}{v^3} d\omega$$

Zustandsdichte pro Phononenzweig (Ast)



$$N = \int_0^{\omega_D} \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{\omega^2}{v^3} d\omega = \frac{V \omega_D^3}{6\pi^2 v^3}; \omega_D = \frac{v}{a} \sqrt[3]{6\pi^2}; \frac{V}{N} \approx a^3 - \text{Gitterkonstante}$$

$\omega \propto vg$

Abscheidefrequenz $\omega_D \Rightarrow$ Debye-Frequenz.

$$\boxed{\omega_D = \frac{v}{a} \sqrt[3]{6\pi^2}}$$

$$D(\omega) = \frac{v\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3} \right) = \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega^2 v}{v_D^3}; \frac{3}{v_D^3} \equiv \frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3}; \text{ typisch } v_L \approx \frac{3}{2} v_T$$

Schwingungsenergie des Kristalls: $v(T) = \int_0^\infty D(\omega) E(\omega, T) d\omega$

Spezifische Wärme: $c_V = \frac{\partial v(T)}{\partial T}$;

$$v = \frac{v}{2\pi^2} \underbrace{\frac{1}{v^3}}_{\frac{3N}{v} \frac{6\pi^2}{\omega_D^3}} \int_0^\infty \omega^2 E(\omega, T) d\omega = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

Debye-Temperatur: $\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$ mit $y = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$, Debye-Formel:

$$c_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{y^4 e^y dy}{(e^y - 1)^2}$$

Debye-Temperaturen:

θ_D, K	Diamant	Be	Si	Al	Cu	Ar	He
2230	1000	640	430	340	92	25	

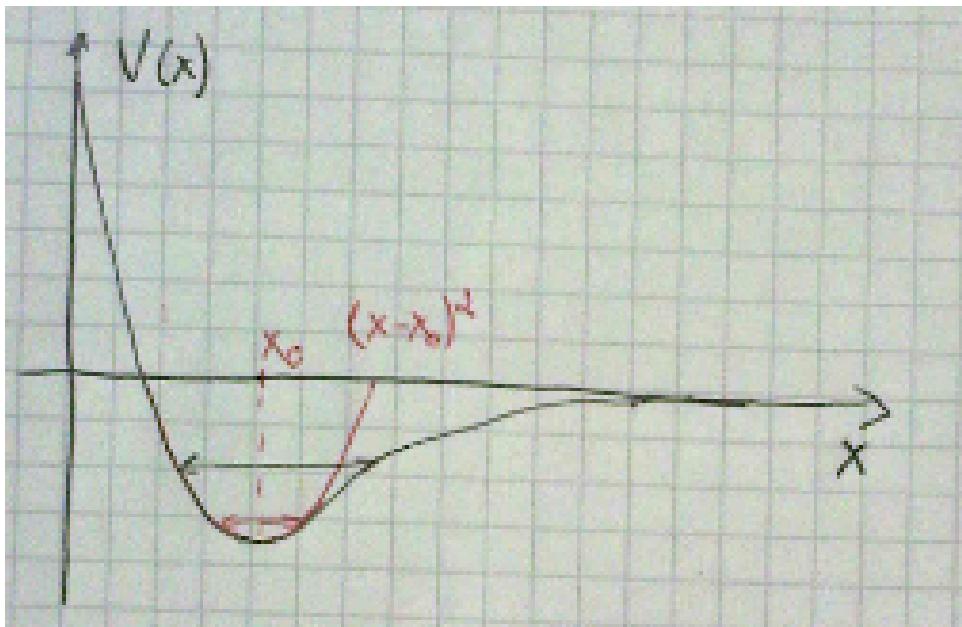
a) $T \ll \theta_D$ tiefen Temperaturen \rightarrow Einstein-Theorie b) $T \gg \theta_D$ hohen Temperaturen \rightarrow klassische Thermodynamik

$$\text{a): } y \rightarrow \infty, \int_0^\infty \frac{y^4 e^y dy}{(e^y - 1)^2} = \frac{4\pi^4}{15}; c_v = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \approx T^3; T^3\text{-Gesetz}$$

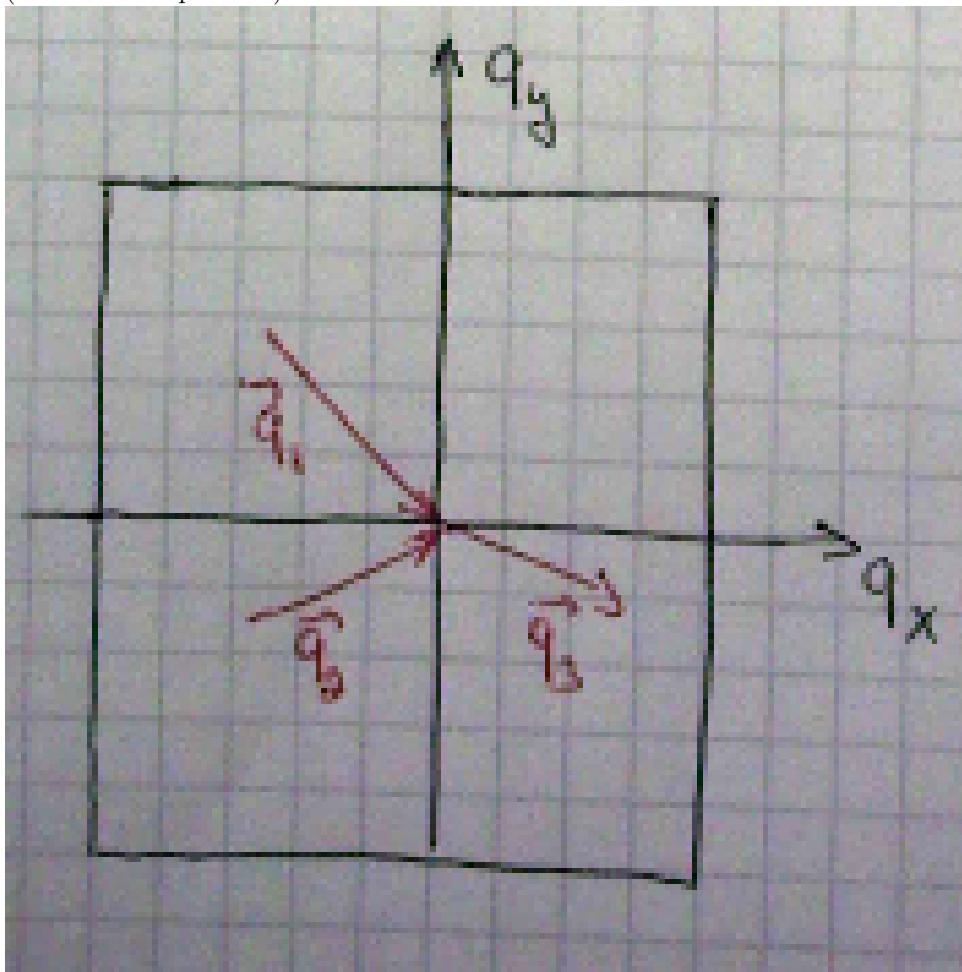
$$\text{b): } y \rightarrow 0, \int_0^{\theta_D/T} \dots dy \approx \int_0^{\theta_D/T} \frac{y^4 \cdot 1}{(1+y-1)} dy = \int_0^{\theta_D/T} y^2 dy = \frac{1}{3} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3, c_V = 3Nk_B, \text{ Dulong-Petit Gesetz.}$$

6.7 Anharmonische Effekte

Klassisch gesehen ein Anharmonischer Effekt ist eine Abweichung von harmonischen Potential.



Auslenkungen sind nicht mehr klein! dann bekommt man die anharmonische Effekte.
 Quantenmechanisch die Anharmonischen Effekte kann man als Wechselwirkung zwischen Phononen beschreiben
 (Phononenstoßprozesse)



Normale Prozesse: $\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3$

Umklapp-Prozesse: $\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{B}$

6.7 Thermische Ausdehnung

anharmonische Terme

klassisch: $U(x) \approx cx^2 - \underbrace{gx^3 - fx^4}_{\text{anharmonische Terme}} + \dots$; Auslenkung: $\langle x \rangle = \frac{\int_0^\infty dx x e^{-\frac{U(x)}{k_B T}}}{\int_0^\infty dx e^{-\frac{U(x)}{k_B T}}}$ aus der Thermodynamik ergibt sich:

$$\rightarrow \langle x \rangle \approx \frac{3g}{4c^2} k_B T$$

Wärmeausdehnungskoeffizient: $\alpha \equiv \frac{1}{l} \left(\frac{\partial l}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{3} \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p$; $l \propto \langle x \rangle$; $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = - \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v$; $\frac{1}{B} = - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$
 $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \frac{V}{B} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V$;

$$\boxed{\alpha = \frac{1}{3B} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V}$$

$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_T$; F -freie Energie;

$$p = - \frac{\partial}{\partial V} (E_0 + E_z) - \sum_q \frac{\partial(\hbar\omega_g)}{\partial V} \langle n_g(T) \rangle$$

E_0 -Energie des Grundzustands; E_z -Nullpunkt-Schwingungn $\langle n_g(T) \rangle$ -Mittlere Zahl von Phononen für harmonischen Kristall: $c_P = c_V$

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{3B} \sum_q \left[-\frac{V}{\omega_g} \frac{\partial \omega_g}{\partial V} \right] \underbrace{\frac{1}{V} \hbar \omega_g \frac{\partial}{\partial T} \langle n_g(T) \rangle}_{c_v(q)} \\ &= \frac{\partial(\ln \omega_g)}{\partial V} \equiv \gamma_q \end{aligned}$$

γ_q -Grüneisenzahl Grüneisenparameter $\gamma_q \equiv \frac{1}{c_V} \sum_q \gamma_q c_V(q) \approx \text{const.} \approx 1 \div 3$

$$\boxed{\alpha = \frac{\gamma c_V}{3B} \approx 10^{-5} K^{-1}}$$

$\alpha \approx T^3$ für $T \ll \theta_D$; $\alpha \approx \text{const}$ für $T \gg \theta_D$

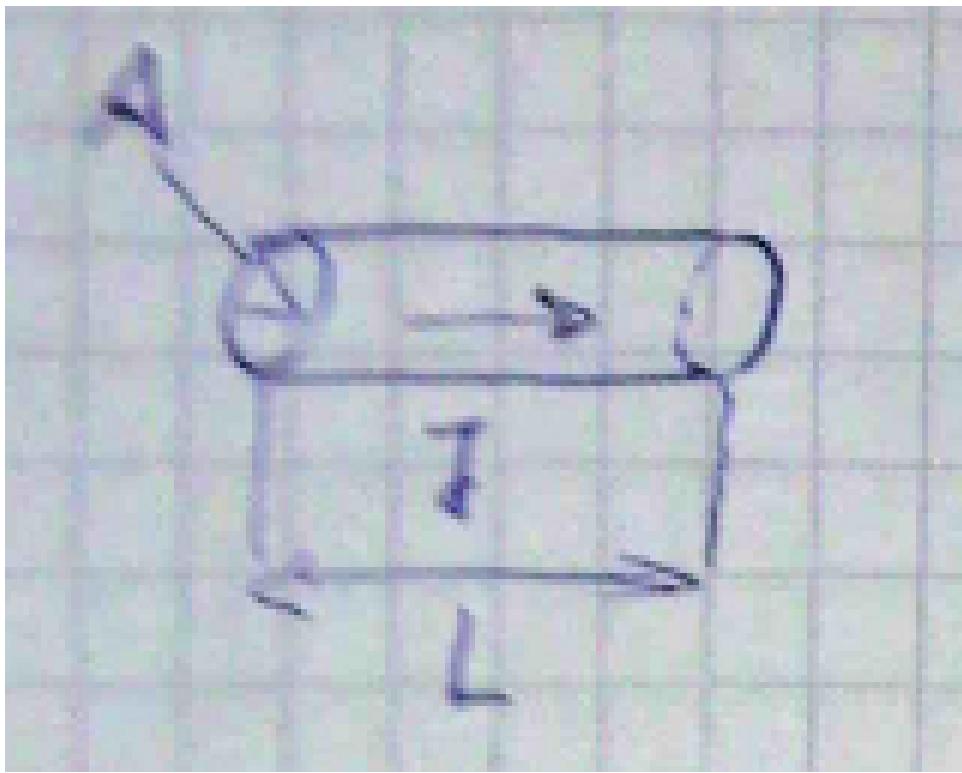
6.7 Wärmeleitfähigkeit

$$\kappa = \kappa^{ph} + \kappa^{el}$$

Wärmestromdichte $\vec{J}_T = -\kappa \nabla T$, nach den kinetischer Gastheorie $\kappa = \frac{1}{3} v l c_v = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v$; l -Länge; τ -mittlere Zeit zur Phononenstöße

6.8 Klassisches Drude Modell

1. e^- haben keine WW mit dem Gitterpotential
2. $e^- e^-$ Wechselwirkung
3. äußere Felder wirken auf die e^-
4. $e^- \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} kT$
5. τ Stoßanzahl, Rekombinationszeit $\frac{1}{\tau} \frac{dt}{\tau} =$ Wahrscheinlichkeit für Stöße



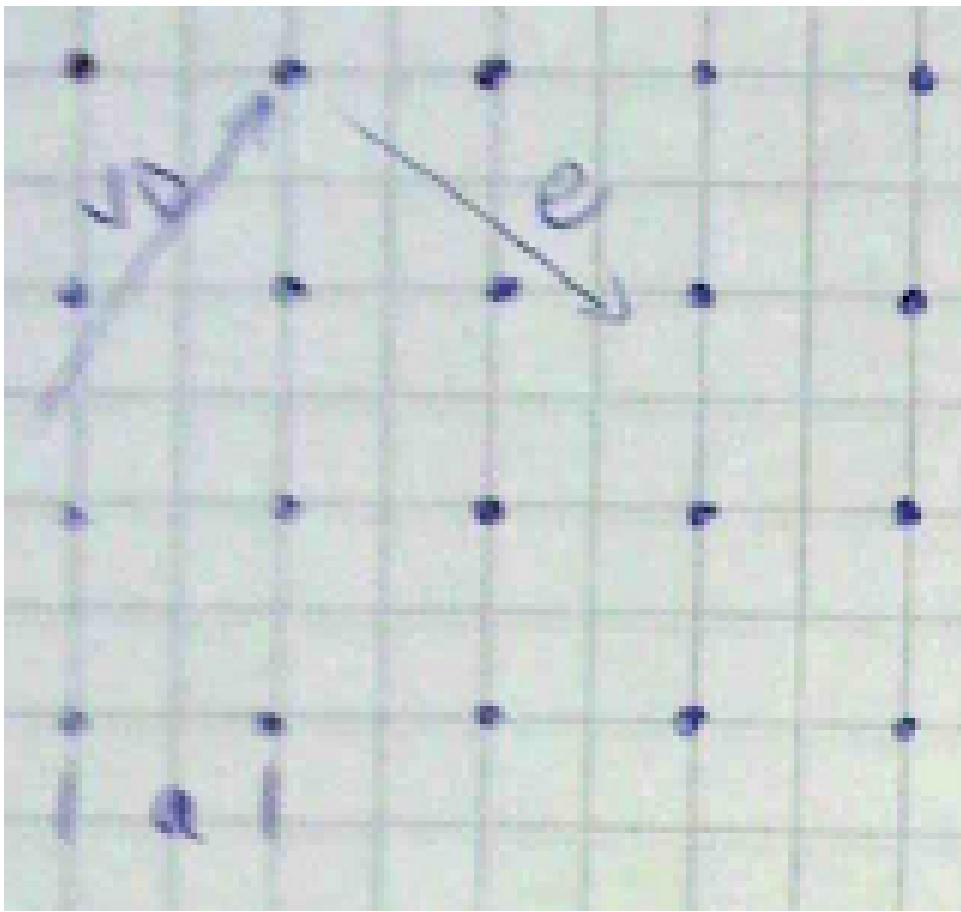
$$\vec{J} = \rho j; j = \sigma \vec{E}; j = \frac{I}{A}; E = \frac{V}{L}; \Rightarrow V = RJ; \frac{\rho L}{A}$$

$$j = -ne\vec{v}_D$$

$$\vec{v}|_{t=t_1} = v'_{t=t_0} - \frac{e\vec{E}t}{m}$$

$$\vec{v}_D = \langle \vec{v} \rangle = \langle v_0 \rangle - \frac{eE\tau}{m} \quad (6.1)$$

$$= \frac{eE\tau}{m} \quad (6.2)$$



$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E}; \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}; \tau = \frac{m}{\rho ne^2} \\ a &\approx 10^{-10} m; \tau = \frac{a}{\sqrt{\langle v \rangle}} \approx \frac{a}{\sqrt{\frac{3k_B T}{m}}} \Rightarrow \tau = 10^{-14} s \\ a|_{300K} &= n 10^{23}, \sigma = 10^5 \frac{1}{\Omega cm} \\ \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} &\approx 10^5 \frac{m}{s}; l = \frac{\langle v^2 \rangle}{\tau} \approx 1 \text{ bis } 10 \cdot 10^{-10} m \\ l|_{4K} &\approx 100 \mu m \end{aligned}$$

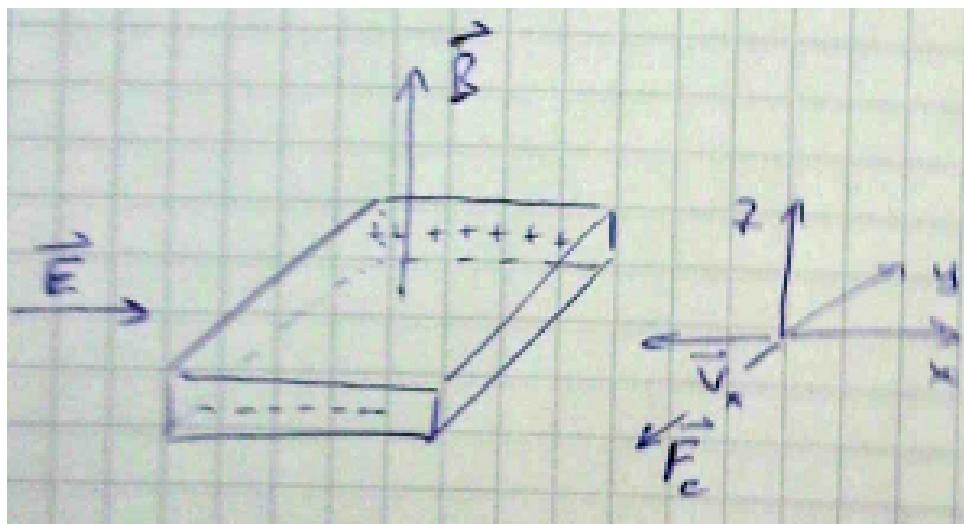
6.8 Impuls Relaxation

$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} \Rightarrow \vec{j} = -\frac{ne\vec{p}}{m}$ Stoßwahrscheinlichkeit: $\frac{dt}{\tau}$ keine Stoßwahrscheinlichkeit $1 - \frac{dt}{\tau}$

$$p(t + dt) = (1 - \frac{dt}{\tau})[p(t) + F(t)dt + \mathcal{O}(dt^2)] \quad (6.3)$$

$$\approx p(t) - \frac{dt}{\tau} p(t) + F(t)dt + \mathcal{O}(dt^2) \quad (6.4)$$

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\frac{p(t)}{\tau} + F(t)$$



$$\mathbf{F} = -e\mathbf{E} - e\vec{v} \times \vec{B}$$

$$E_\gamma = v_x B_z = -\frac{1}{en} j_x B_z = R_H j_x B$$

$$R_H = -\frac{1}{en}$$

Kupfer Cq - $R_H = -5,3 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{c}$ Aluminium Al - $R_H = +9,9 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{c}$

$$\frac{dp}{dt} = -eE - \frac{e}{m}\vec{p} \times \vec{B} - \frac{\vec{p}}{\tau} = 0 \quad (6.5)$$

$$0 = -eE_x - \frac{e}{m}p_y B - \frac{p_x}{\tau} \quad (6.6)$$

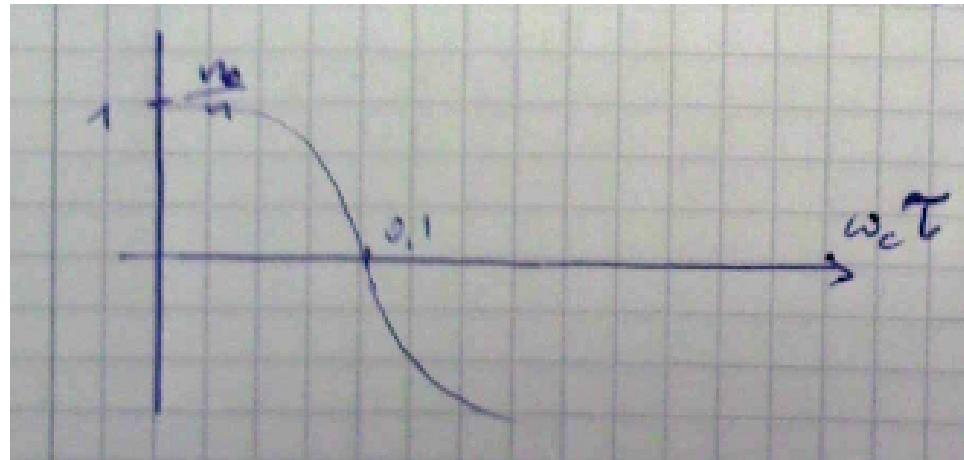
$$0 = -eE_y - \frac{e}{m}p_x B - \frac{p_y}{\tau} \quad (6.7)$$

$$\Rightarrow \sigma E_x = \omega_c \tau j_y + j_x$$

$$\Rightarrow \sigma E_y = -\omega_c \tau j_y + j_y$$

Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{e}{m} B$$



Laut Drude sollte $\omega_C \tau \propto B$ sein, ist es aber nicht (warum, nicht kapito)

6.8 Wechselstromleitfähigkeit

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}; E(t) = \text{Re}\{E(\omega)e^{-i\omega t}\}$$

Versuch der Lösung

$$p(t) = -\text{Re}\{p(\omega)e^{-i\omega t}\}$$

$$-i\omega\vec{p}'(\omega) = -\frac{\vec{p}(\omega)}{\tau} - e\vec{E}; \vec{j} = -\frac{ne}{m}\vec{p} \Rightarrow j(t) = \text{Re}\{j(\omega)e^{-i\omega t}\}$$

$$j(\omega) = -\frac{ne}{m}p(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{\vec{E}(\omega)}{\frac{1}{\tau} - i\omega} \equiv \sigma(\omega)\vec{E}(\omega)$$

$$\boxed{\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}}$$

Magnetfeld $H(\omega) \approx 0$; $\frac{v}{c} \ll 1$; $v_D \approx 10^{-3} \frac{m}{s}$
 Maxwell-Gleichungen $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \gg e$ Ampersche Gesetz: $\vec{\nabla} \times \vec{H} = j + \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\nabla^2 E = i\omega\mu_0\sigma\vec{E} - i\omega\epsilon_0\vec{E} \quad (6.8)$$

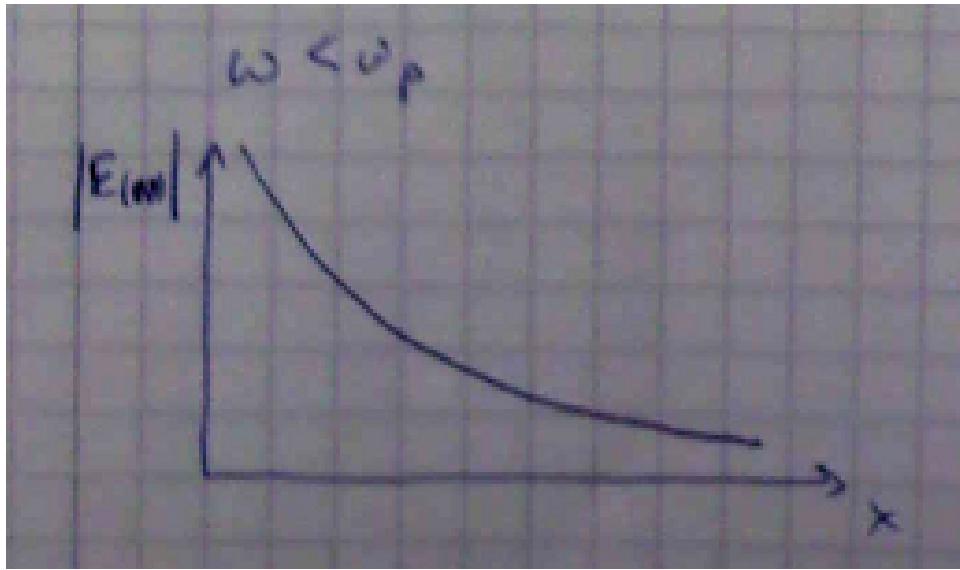
$$= w^2\epsilon_0\mu_0\epsilon(\omega)\vec{E} \quad (6.9)$$

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega}$$

$$1. \text{ hohe Frequenzen } \sigma(\omega) = \omega_0 \frac{1+i\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2} \approx \sigma_0 \frac{i}{\omega\tau}; \Rightarrow \epsilon(\omega) = 1 - \frac{\sigma_0}{\epsilon_0\tau\omega^2} = \frac{\omega_0^2}{\omega^2}$$

Die Plasmafrequenz, ist gerade die Frequenz wo die e^- dem Feld noch folgen können.

$$\omega_p = \frac{ne^2\tau}{m\epsilon_0\tau} = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$$



2. kleine Frequenzen $\omega\tau \ll 1$

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + i\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} = \sigma_0(1 + i\omega\tau)$$

$$\epsilon(\omega) = 1 + \sigma(\text{mega}) \frac{1}{\epsilon_0\omega} = 1 + \sigma_0 \left(\underbrace{\frac{i}{\epsilon_0\omega}}_{\epsilon_2} - \underbrace{\frac{\tau}{\epsilon_0}}_{\epsilon_1} \right)$$

$$\epsilon(\omega) == i\epsilon_2$$

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon(\omega)} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\sigma_0}{\epsilon_0 \omega}} \frac{1+i}{\sqrt{2}} = \frac{1}{s}(1+i)$$

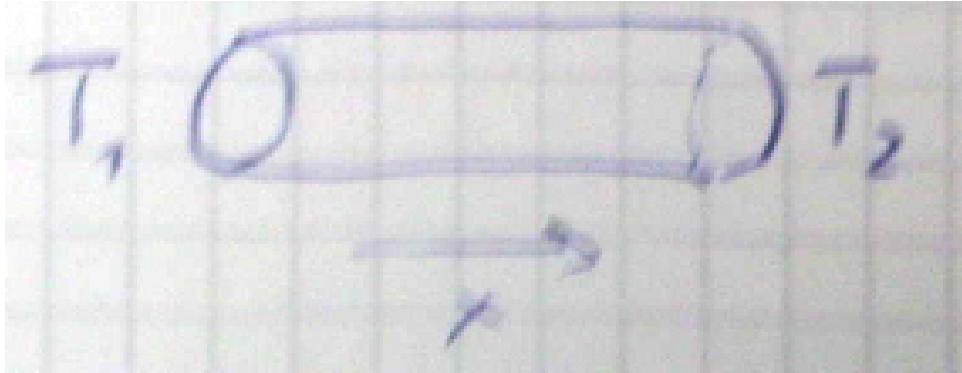
$$s = c \sqrt{\frac{2\epsilon_0}{\sigma_0 \omega}}$$

s ist der Skin oder Leitschichtdicke (Dimension Länge) oder der Skin-Effekt. Der Strom fließt nun noch an der Oberfläche des Leiters.

1853 Widermann-Franz. Die Wärmeleitfähigkeit und die Leitfähigkeit ist zur Temperatur proportional:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT$$

L-Loreenzahl zwischen $2,2 - 2,8 \cdot 10^{-3} \frac{\omega \Omega}{K^2}$



$$j^T = \kappa \nabla T$$

$$j_x^T = \left\langle \frac{1}{2} v_x [u_x(x - v\tau)i - u_c(x + v\tau)] \right\rangle \quad (6.10)$$

$$= n \langle v_x^2 \rangle \tau \frac{du_e}{dT} \left(-\frac{dT}{dx} \right) \quad (6.11)$$

$$c_v = n \frac{du}{dT}; \langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle$$

$$j^T = \underbrace{\frac{1}{3} v^2 \tau c_v}_{\kappa = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v = \frac{1}{3} l v c_v}$$

$$LT = \frac{\kappa}{\sigma} = \frac{c_v}{ne^2} \frac{mv^2}{3}$$

$$\Rightarrow c_v = \frac{3}{2} n k_B$$

$$L = \frac{\kappa}{\sigma} \frac{3}{2} n k_B \frac{k_B^2}{K^2} T = 1,1 \cdot 10^{-3} \frac{\omega \Omega}{K^2} \frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2} k_B T$$

tatsächlich: c_v^2 Faktor 100 kleiner, v^2 ist ein Faktor 100 größer

6.9 Sommerfeld-Theorie der Metalle

Klassische Ideales Gas Maxwell-Bolzmann Verteilung

$$f_{MG} = f(v) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{k_B T}}$$

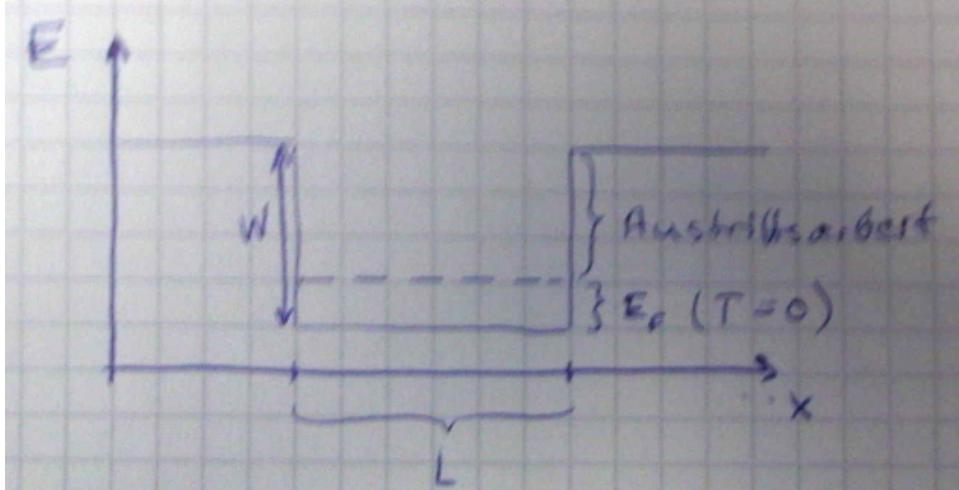
Pauliprinzip:

Fermi Dirac Verteilung

$$f_{FD} = f(v) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^3 \frac{2}{e^{\frac{mv^2/2 - \mu}{k_B T}} + 1}$$

$$n = \int_V f(v) dV; k_B T_0 = \nu$$

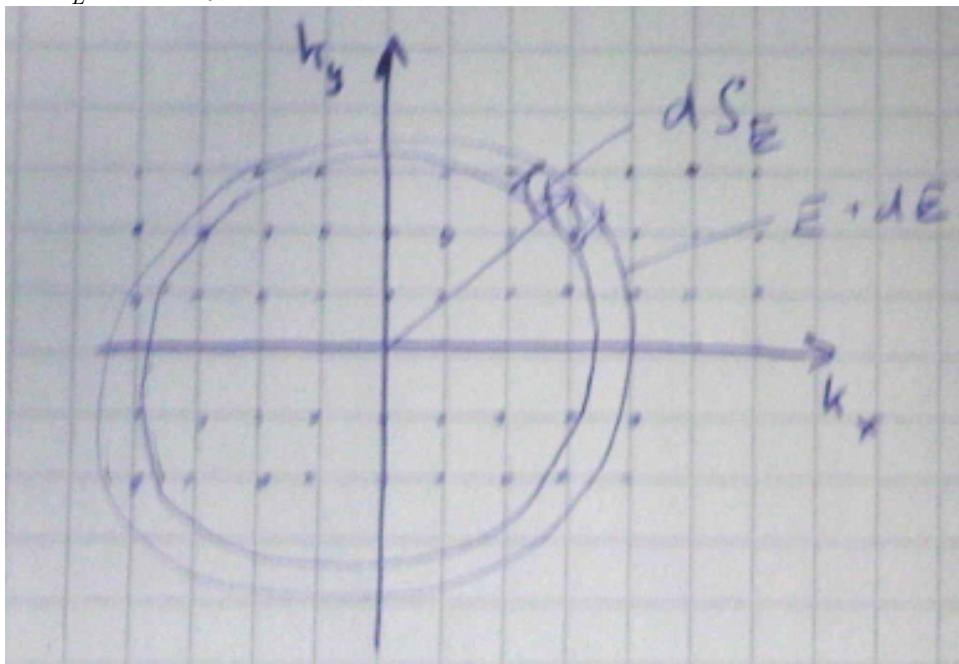
Zustandsdichte des freien Elektronen Gases:



N Elektronen SchrGl: $-\frac{\hbar}{2m} \nabla \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$; $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-\vec{k}\vec{r}}$; $1 = \int_V |\psi(\vec{r})|^2 dV$; $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$;

Peridizitätsbedingung: $\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z)$

$$k_i = \frac{2\pi}{L} m_i \quad i = x, y, z; m = 1, 2, 3$$



$$\mathcal{D}(E)dE = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_E^{E+dE} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \int_{E=const.} \frac{dS_E}{v_g}$$

$$\rho_x = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

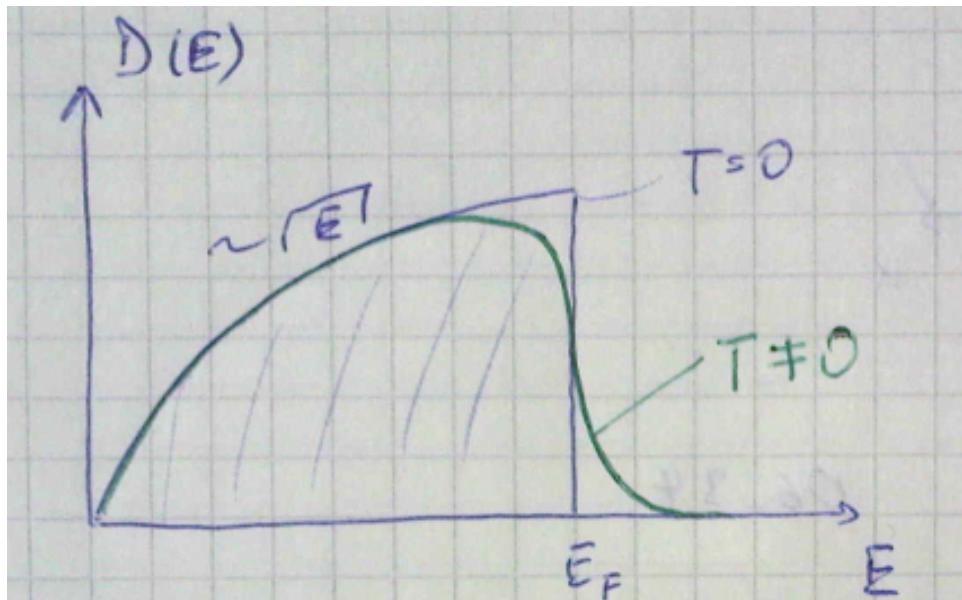
$$\text{Gruppengeschwindigkeit: } v_g = \frac{\partial E}{\partial(\hbar k)} = \frac{\hbar k}{m}$$

Randbemerkung: $\frac{1}{v_g} \int dS_E = \frac{1}{v_g} - 4\pi k^2$

$$\mathcal{D}_\uparrow(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \frac{m}{\hbar k} 4\pi k^2 = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^2} V \sqrt{E}$$

Volumen normierte und mit 2 e^- besetzte Zustandsdichte:

$$\mathcal{D}(E) = \frac{1}{V} (\mathcal{D}_\uparrow + \mathcal{D}_\downarrow) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{E}$$

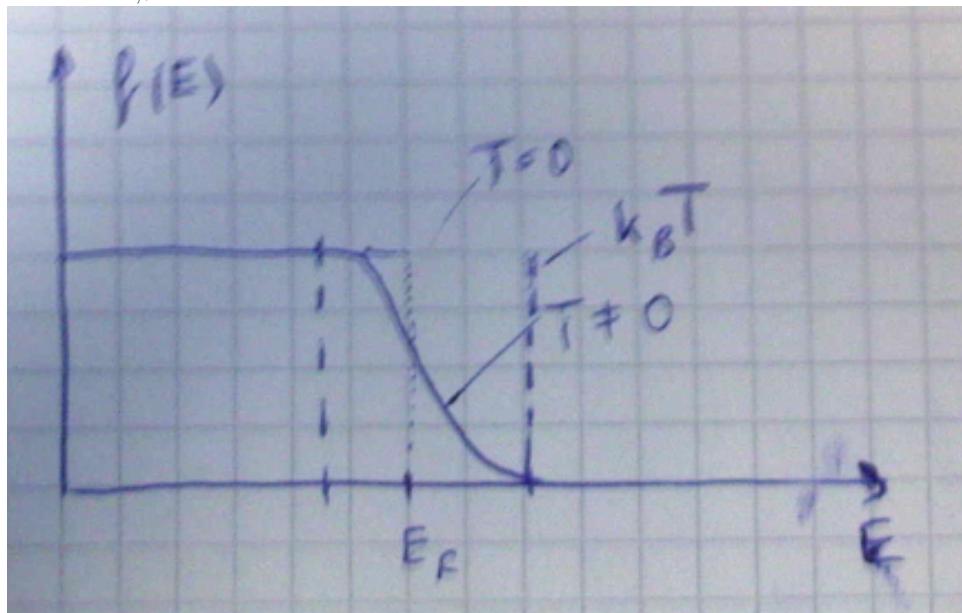


$$\rho_k^\infty = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^\alpha$$

$$D^{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2}; D^{1D}(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2}{E}}$$

$$f(E, T=0) = \begin{cases} 1 & E < \mu \\ \frac{1}{2} & E = \mu \\ 0 & E > \mu \end{cases}$$

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = E_F(T=0)$$



$$n = \frac{N}{V} = \int_0^\infty \mathcal{D}(E) f(E, 0) dE = \int_0^{E_F}$$

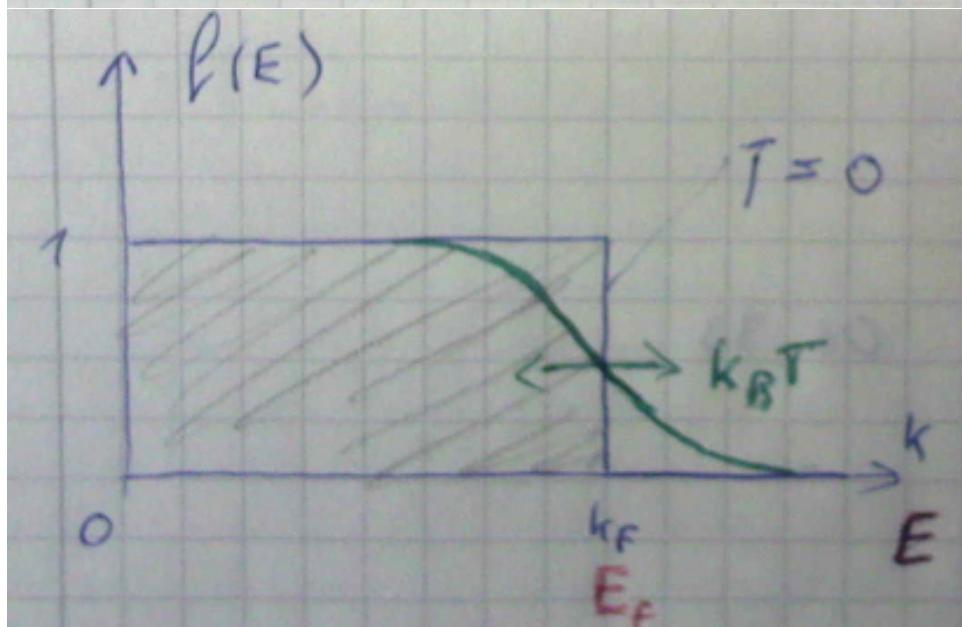
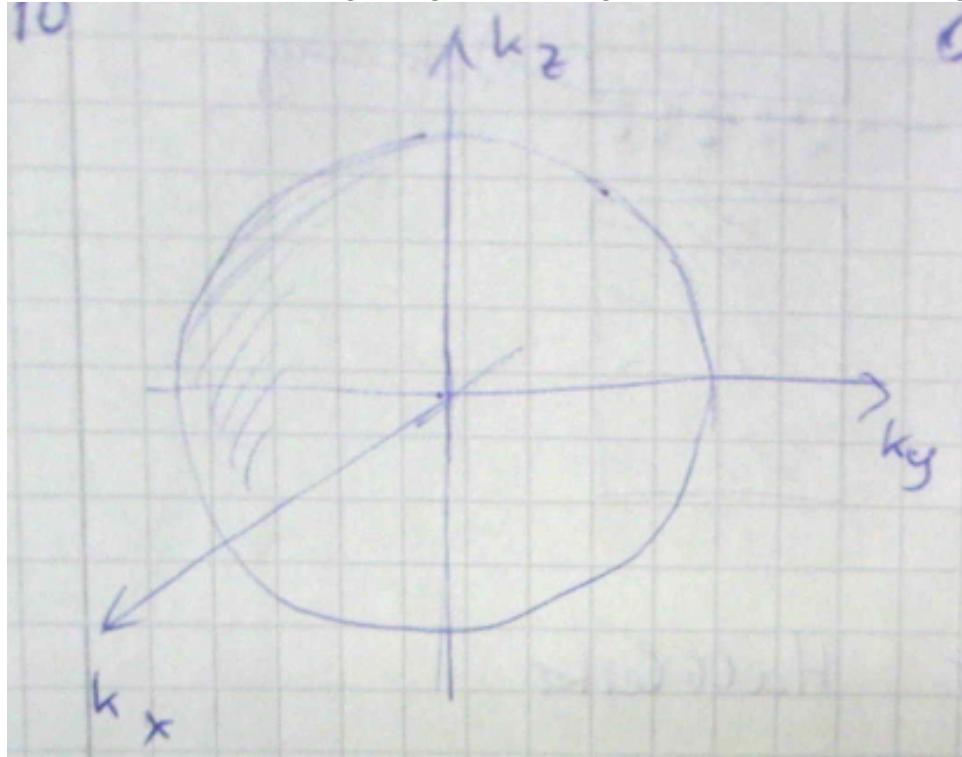
$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

Fermi-Energie: $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$ mit Elektronendichte $n = \frac{N}{V}$ Fermi-Wellenvektor $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ Fermi-Impuls: $p_F = \hbar k_F$ Fermi-Geschwindigkeit $v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$ Fermi Temperatur $T_F = \frac{E_F}{k_B}$

	$n/10^6 m^{-3}$	k_f/A^{-1}	$v_F 10^6 \frac{m}{s}$	E_F/eV	FT/K_F
Al	18,1	1,8	2,0	11,7	135000
Cu	8,5	1,4	1,6	7,0	82000
Ag	5,9	1,2	1,4	5,5	64000

$$\mu(T) \approx E_F [1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2]$$

TODO Einleitende Abbildungen möglich am anfang von Sommerfeldtheorie einfügen



Kurze Einleitung was die Quantennatur der Theorie ist (Pauliprinzip, Besetzung in der Fermikugel, nur an der Fermikante befindliche Elektronen sind relevant für verschiedene Effekte)

6.9 Spezifische Wärme

$c_V = \frac{\partial}{\partial T} U(T)$ mit U als innere Energie

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} U(T) \quad (6.12)$$

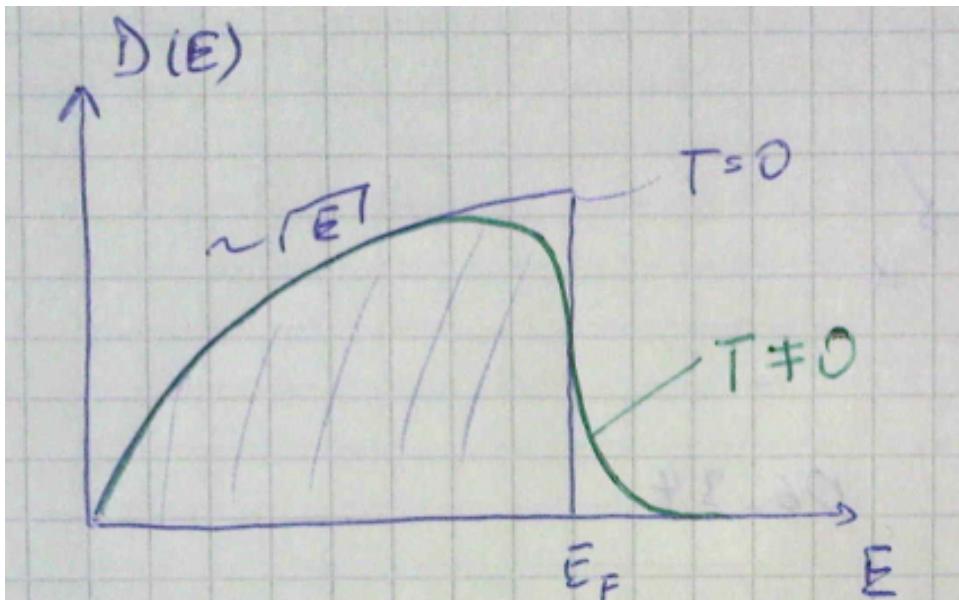
$$= \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty E D(E) f(E, T) dE \quad (6.13)$$

$$= \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{3/2} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1} \quad (6.14)$$

$$D(E) = \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{E}}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (6.15)$$

$$= \frac{3}{2} n \sqrt{E} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \right]^{-3/2} \quad (6.16)$$

$$= \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} \left(\frac{E}{E_F} \right)^{1/2} \quad (6.17)$$



'grobe'-Rechnung:

$$U(0) = \int_0^{E_F} E D(E) dE \quad (6.18)$$

$$= \frac{3}{2} \frac{n}{E_F^{3/2}} \frac{2}{5} E_F^{5/2} \quad (6.19)$$

$$= \frac{3n}{5} E_F \quad (6.20)$$

$$= \frac{3n}{5} k_B T \quad (6.21)$$

Temperaturabhängige Anteil der innerer Energie:

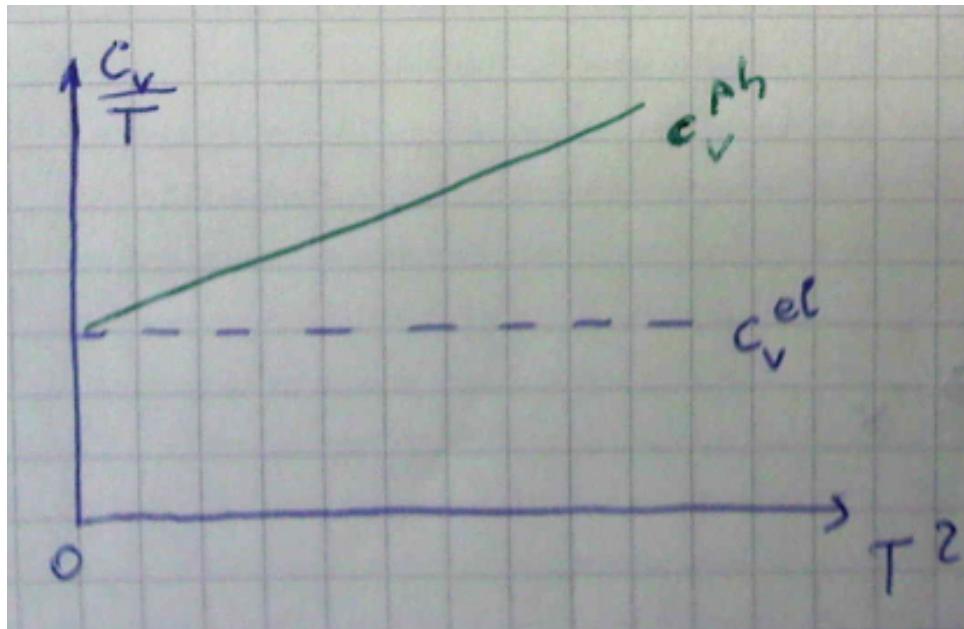
$$\delta U(T) = U(T) - U(0) \approx n k_B T \frac{T}{T_F} = n k_B \frac{T^2}{T_F}$$

$\frac{T^2}{T_F}$ der Bruchteil der Elektronen der die thermische Energie $k_B T$ pro Elektron aufnehmen kann

$c_V \approx \frac{\partial}{\partial T} [\delta U(T)] = \frac{2n k_B T}{T_F}$ ist um Faktor $\frac{T}{T_F}$ kleiner als mit einem klass. Gas.

exaktere Näherungslösung: $U(T) \approx U(0) + \frac{\pi^2}{6} D(E_F) (k_B T)^2$; $c_V = \gamma T$; mit Sommerfeldkonstanten $\gamma = \frac{\pi^2 3n k_B}{3T_F^2}$

$$c_V^{\text{ges}} = c_V^{\text{el}} + c_V^{\text{ph}} = \gamma T + \begin{cases} \beta T^3, & T \ll \theta_D \\ 3R = \text{const}, & T > \theta_D \end{cases}$$



Offene Fragen nach Sommerfeld-Modell:

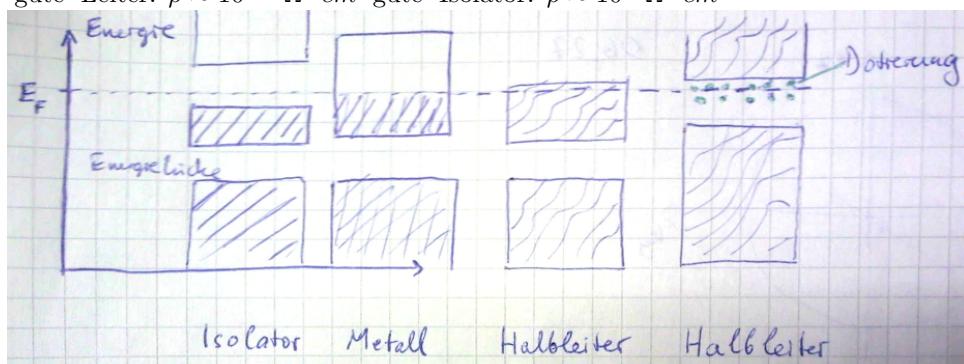
1. Warum collidieren e^- -nen nicht mit Ionen?
2. Warum teilen/unterscheiden wir zwischen Metalle, Halbleiter, Isolatoren?
3. Warum wechselwirken e^- -nen nicht mit einander?

Die ersten zwei Fragen sind von Bloch-Theorie beantwortet. Die dritte Frage - Fermi-Flüssigkeiten (komplizierte QM-Theorie)

6.10 Energiebänder

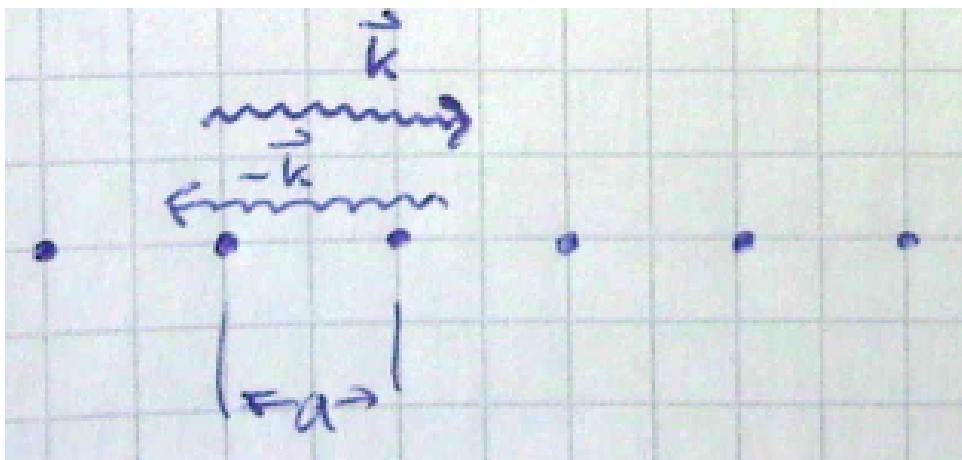
Oder warum unterscheiden wir zwischen Halbleiter, Leiter und Isolatoren.

'gute' Leiter: $\rho \approx 10^{-10} \Omega \cdot \text{cm}$ 'gute' Isolator: $\rho \approx 10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$



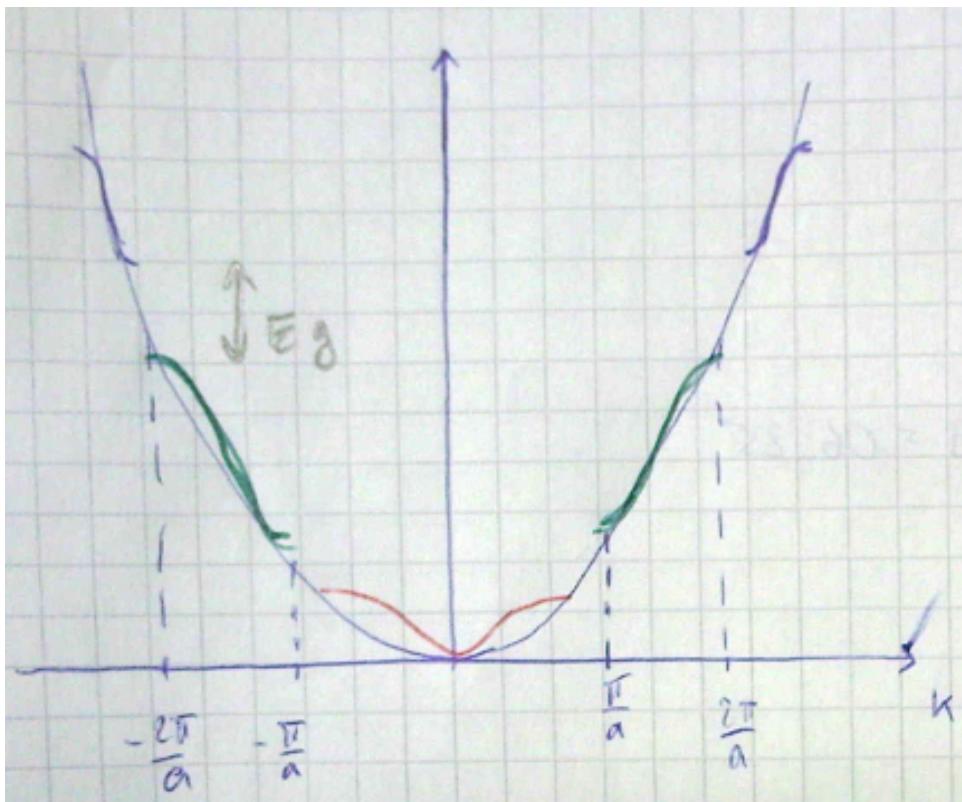
1 Beispiel: Modell des nahezu freien Elektronen

$$E_x = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \text{ Wellenfunktion } \psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}}$$



Laue (Bragg-Reflektion) $-\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}$ mit reziproken Gitter \vec{G}

$$(-\vec{k} + \vec{G})^2 = \vec{k}^2 \Rightarrow 2kG = G^2; \quad k = \frac{G}{2} = \pm \frac{\pi}{2} n_G$$

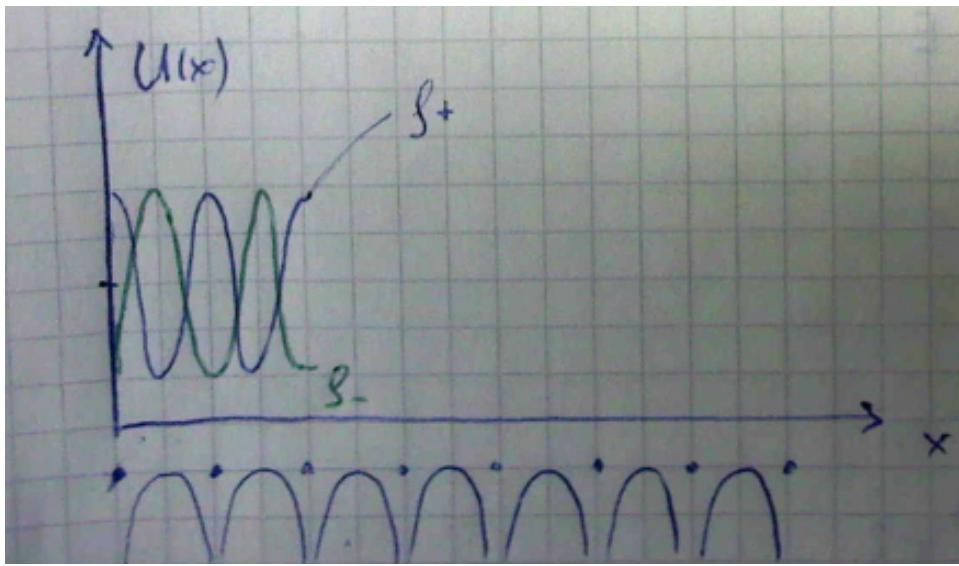


Zwei verschiedene Stehende Wellen:

$$\psi_+ \propto e^{i\frac{\pi x}{a}} + e^{-i\frac{\pi x}{a}} = 2\cos\frac{\pi x}{a}$$

$$\psi_- \propto e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}} = 2i\sin\frac{\pi x}{a}$$

Gruppengeschwindigkeit $v_G = \frac{\partial E_k}{\partial p} = \frac{\hbar k}{m} \Big|_{k=\pm\frac{\pi}{a}} = ! 0;$



$$\rho_+ = |\psi_+|^2 \propto \cos^2 \frac{\pi x}{a} = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 \frac{2\pi x}{a})$$

$$\rho_- = |\psi_-|^2 \propto \sin^2 \frac{\pi x}{a} = \frac{1}{2}(1 - \cos^2 \frac{2\pi x}{a})$$

Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^* \psi = |\psi|^2$; $\rho_0 = 1e = e^{-ikx} e^{ikx}$

Erwartungswert der Potentiellen Energie: $E_{\rho_+} < E_{\text{frei}} < E_{\rho_-}$, $U(x) = U \cos \frac{2\pi x}{a}$;

$$E_g = \frac{1}{a} \int dx U(x) [|\psi_-|^2 - |\psi_+|^2] \quad (6.22)$$

$$= \frac{2U}{a} \int_0^a dx \cos \frac{2\pi x}{a} \frac{1}{2} [1 - \cos \frac{2\pi x}{a} - 1 - \cos \frac{2\pi x}{a}] \quad (6.23)$$

$$= \frac{2U}{a} \int_0^a dx \cos^2 \frac{2\pi x}{a} \quad (6.24)$$

$$= \frac{U}{a} \int_0^a dx (1 + \cos \frac{4\pi x}{a}) \quad (6.25)$$

$$= \frac{U}{a} \left(x + \frac{a}{4\pi} \sin \frac{4\pi x}{a} \right) \Big|_0^a \quad (6.26)$$

$$\equiv U = E_B - E_A \quad (6.27)$$

Elektronen in einem periodischen Potential (QM)

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

Translationsinvariant: $\tilde{V}(\vec{r}) = \tilde{V}(\vec{r} + \vec{l})$

Entwicklung nach reziproken Gittervektoren \vec{G} (blochscher Ansatz)

$$\tilde{V}(\vec{r}) = \sum_G \tilde{V}_G \cdot e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_k c_k e^{ik\vec{r}}$$

Einsetzen in die SGL:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_k e^{i\vec{k}\vec{r}} + \sum_{k', \vec{G}} c_{k'} \tilde{V}_G e^{i(k' + \vec{G})\vec{r}} \equiv \sum_k c_k e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Umbenennung (summe über alle k'): $k' + \vec{G} = k \rightarrow$

$$0 = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \underbrace{\left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \sum_G \tilde{V}_G c_{\vec{k}-\vec{G}} \right]}_{=0}$$

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_k + \sum_G \tilde{V}_G c_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$$

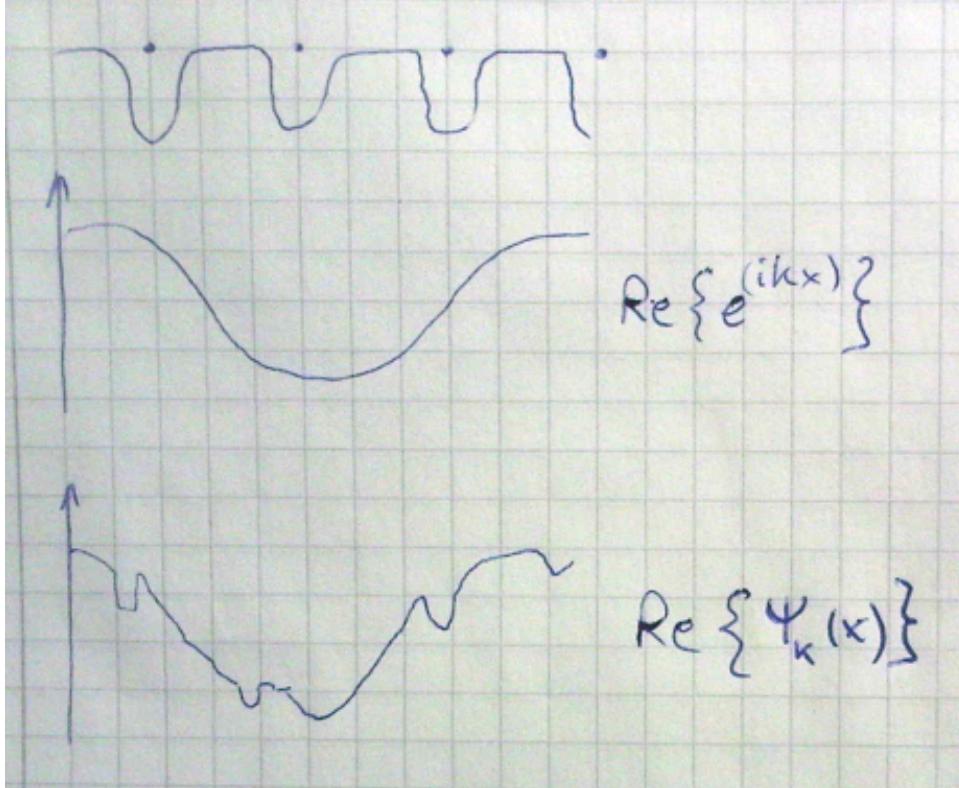
Dieser Satz algebraischer Gleichungen ist die Darstellung der Schrödinger Gleichung im \vec{k} -Raum $\Rightarrow E_k$ -Energie Eigenwert.

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\vec{r}} \quad (6.28)$$

$$= \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\text{ebene Welle}} \underbrace{\sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}}}_{U_k(\vec{r})} \quad (6.29)$$

$$= U_k(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (6.30)$$

Bloch Theorem: Die Eigenfunktionen der SG. für ein periodisches Potential sind das Produkt aus einer ebenen Welle und einer Funktion $U_k(\vec{r})$ mit der Periodizität des Gitters.



$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}) = \underbrace{U_k(\vec{r} + \vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\psi_{\vec{r}}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \quad (6.31)$$

$$\psi_{k+G}(\vec{r}) \sum_G c_{k+g'-G} e^{i(\vec{k}+\vec{G}'-G)\vec{r}}$$

Umbenennung $G'' = G - G'$

$$\Rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}} \sum_{G''} \underbrace{c_{\vec{k}-\vec{G}''} e^{-i\vec{G}''\vec{r}}}_{U_{\vec{k}}(\vec{r})}$$

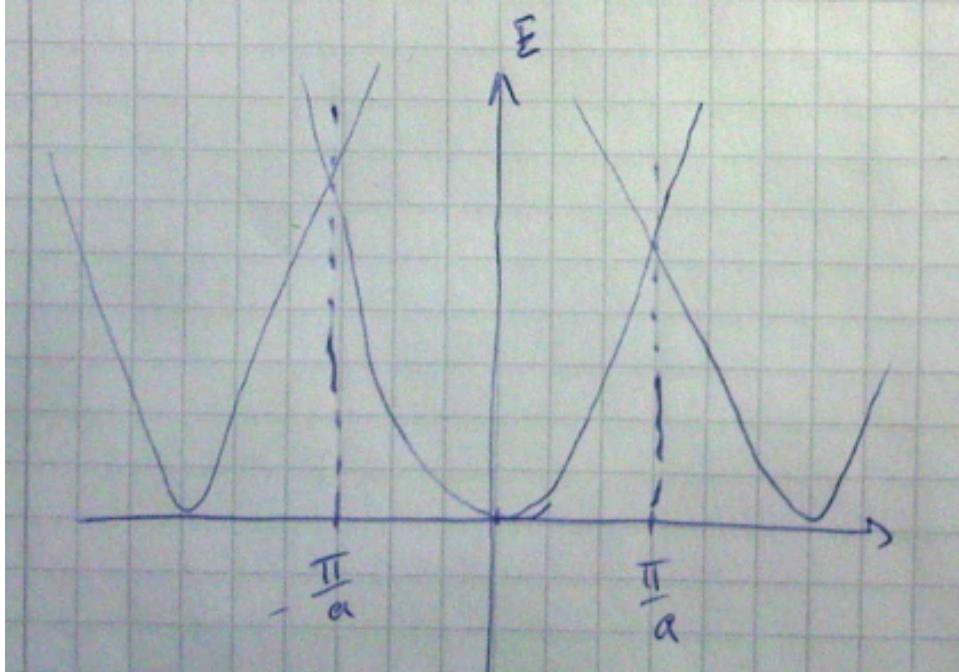
$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}+\vec{a}}(\vec{r}) = \psi_k(\vec{r})$$

$$H\psi_{k+G}(\vec{r}) = E_{\vec{k}+\vec{G}'}\psi_{\vec{k}+\vec{G}'}(\vec{r})$$

$$H\psi_k(\vec{r}) = E_{\vec{k}+\vec{G}'}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow E_{k+G'} = E_k$$

Lösung der SG. an der Grenze der Brillouin Zone.



$$(E - \frac{\hbar^2}{2m}|k - G|^2)c_{k-G} = \sum_G \tilde{V}_{G'} c_{k-G-G'}$$

$$c_{k-G} = \frac{\sum_G \tilde{V}_{G'} c_{k-G-G'}}{E - \frac{\hbar^2}{2m}|k - G|^2} \quad (6.32)$$

$$= \frac{\sum_{G''} V_{G''-G} c_{k-G''}}{\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - |k - G|^2)} \quad (6.33)$$

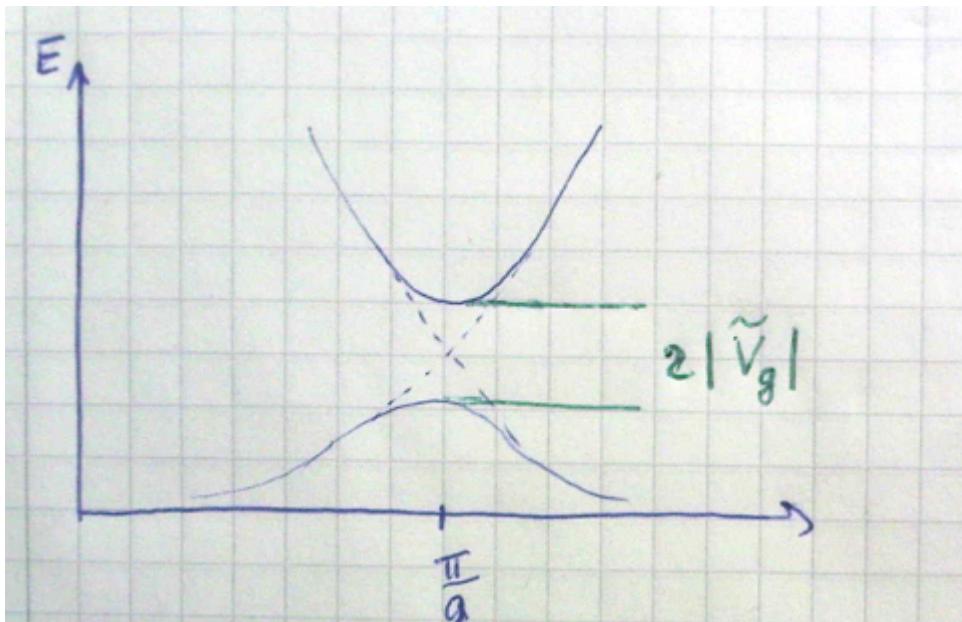
Umbenennung: $G = G'' - G$ Nullstellen: $k^2 = |\vec{k} - \vec{G}|^2$ Abkürzungen $g = \frac{2\pi}{a}$; $G = 0, G = g; \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
Zwei Komponenten Näherung

Erste Bedingung: $\rightarrow (\lambda_k - E)c_k + \tilde{V}_g c_{k-g} = 0$ zweite Bedingung: $\rightarrow (\lambda_{k-g} - E)c_{k-g} + \tilde{V}_g c_k = 0$

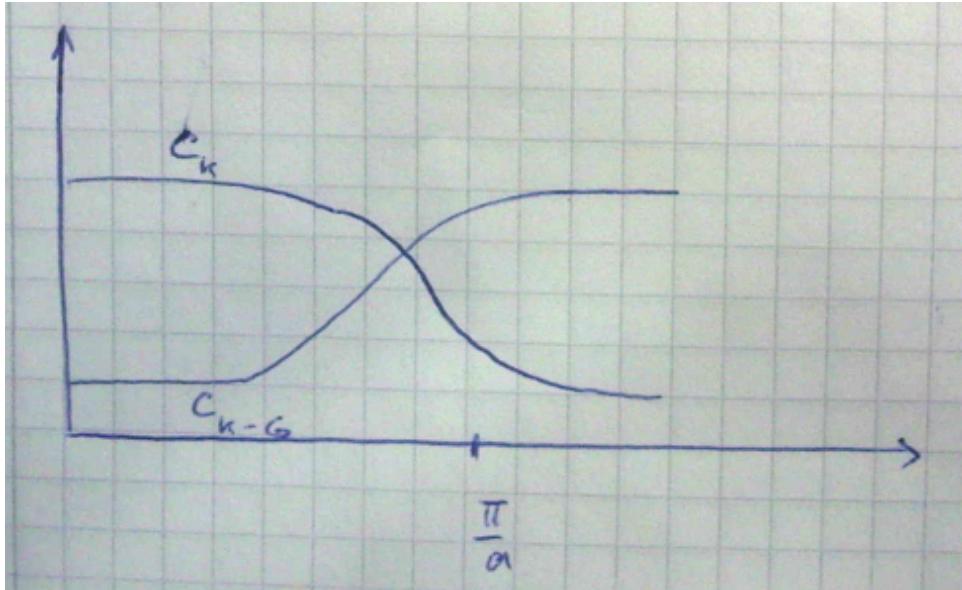
Daraus resultieren Energieniveaus: $E_{\pm} = \frac{1}{2}(\lambda_{k-g} + \lambda_k) \pm \sqrt{(\lambda_{k-g} - \lambda_k)^2 + \tilde{V}_g^2}$ und $k = \frac{g}{2} \rightarrow \lambda_{k-g} = \lambda_k$

An der Grenze der Brillouin Zone

$$E_{\pm} = E_{\frac{g}{2}} \pm |\tilde{V}_g|$$

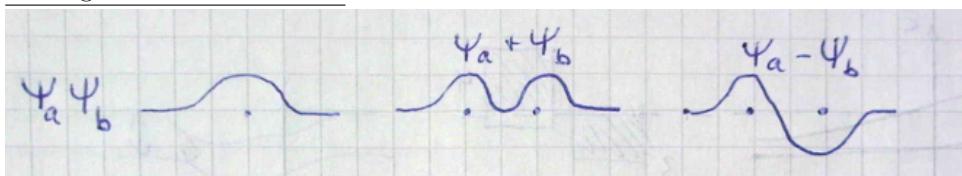


$$\frac{c_{k-G}}{c_k} = \frac{E-\lambda}{\tilde{V}_g}$$

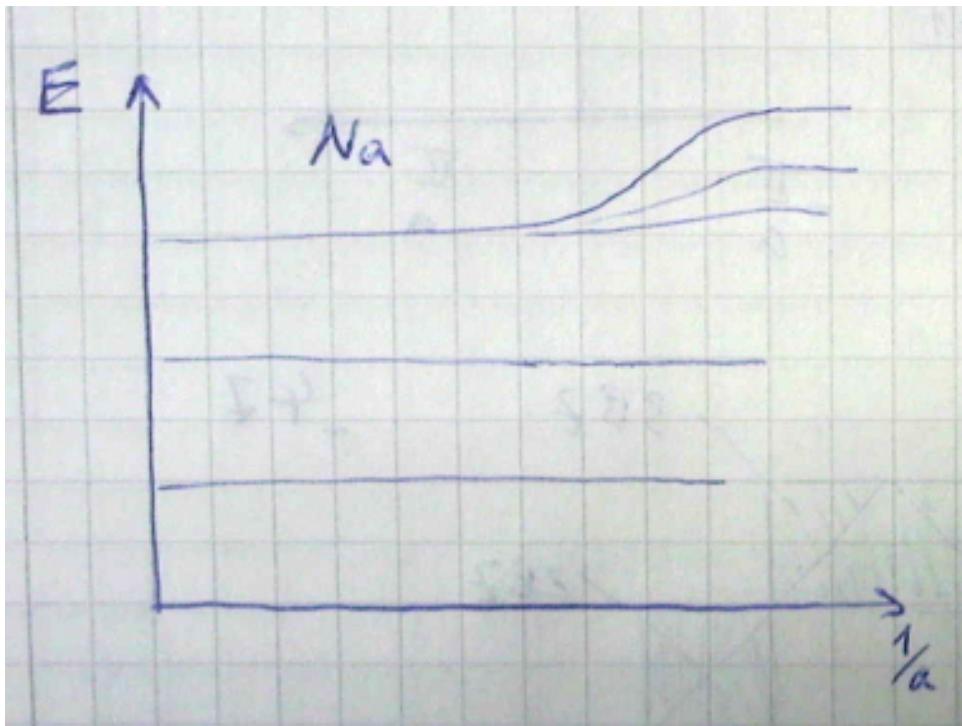


6.11 Tight-binding Model

'stark gebundene Elektronen'



$$\rho \propto |\psi_a - \psi_b|^2$$



LCAO = Linear Combination of Atomic Orbitals

$$H\phi = E\phi$$

$$H = H_A + H_S \quad (m \neq n)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla + \tilde{V}(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad R_m \equiv \text{Gittervektor}$$

$$H_S = \sum_{n \neq m} \tilde{V}_A(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Energie eigenwerte E_k

$$E_k = \frac{\int \psi^* H \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}$$

$$\psi_k = \sum_m a_m \phi(\vec{r} \cdot \vec{R}_m) \quad a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}_m} \quad N \equiv \text{Anzahl der Atome}$$

Bloch-Funktionen \rightarrow orthonormal Basis lokalisierter Zustände Wnnier-Funktionen

$$w_m(\vec{r} \cdot \vec{R}_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i \vec{k}_m \cdot \vec{R}_m} \psi_k(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{k}_m \cdot \vec{R}_m} w_m(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$E_{\vec{k}} = \underbrace{\frac{1}{\int \phi^* \phi dV}}_{=1 \quad \text{Wellenfkt kaum Überlappung}} \frac{1}{N} \sum_{m,n} e^{i k(R_m - R_n)} \int \phi^*(r - R_n) [H_A + H_S(\vec{r} - \vec{R}_m)] \phi(r - \vec{R}_m) dV$$

$$\alpha = - \int \phi^*(r - R_m) H_s(\vec{r} - \vec{R}_m) \phi(r - \vec{R}_m) dV \equiv \text{Energieänderung durch das Nachbarpotential}$$

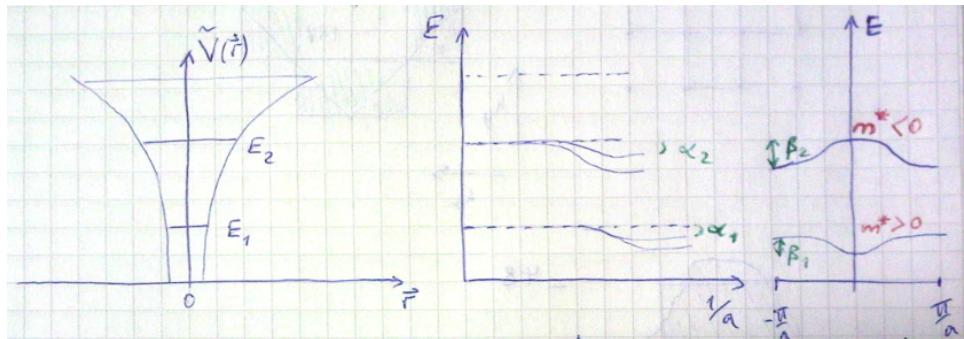
$$\beta = - \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}_n) H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) \phi(r - \vec{R}_n) dV \equiv \text{Energieänderung durch den Überlapp der W.F.}$$

$$E_{ki} = E_i - \alpha_i - \sum \beta_{i,n} e^{ik(R_n - R_m)} \quad (6.34)$$

$$= E_i - \alpha_i 2\beta_i (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (6.35)$$

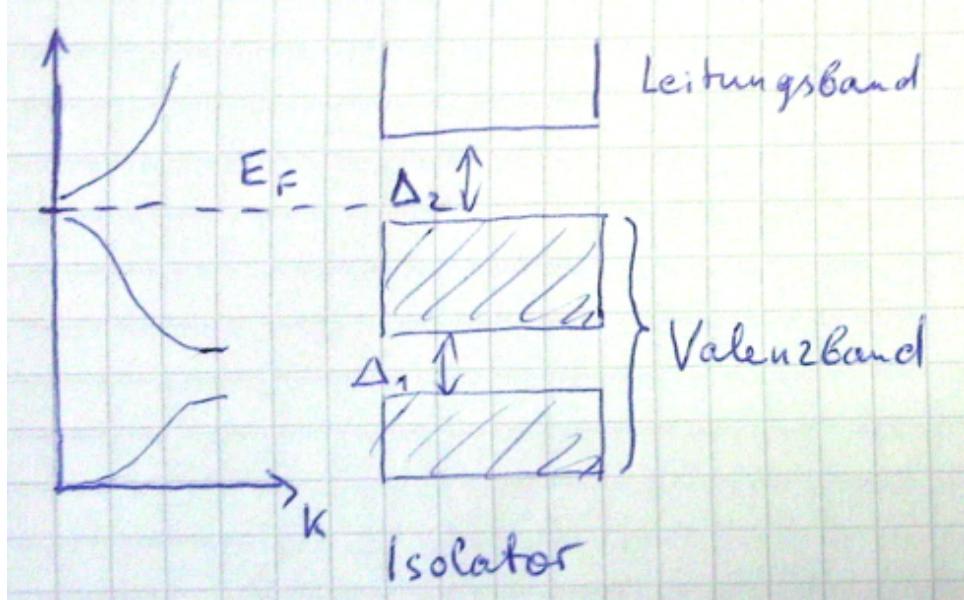
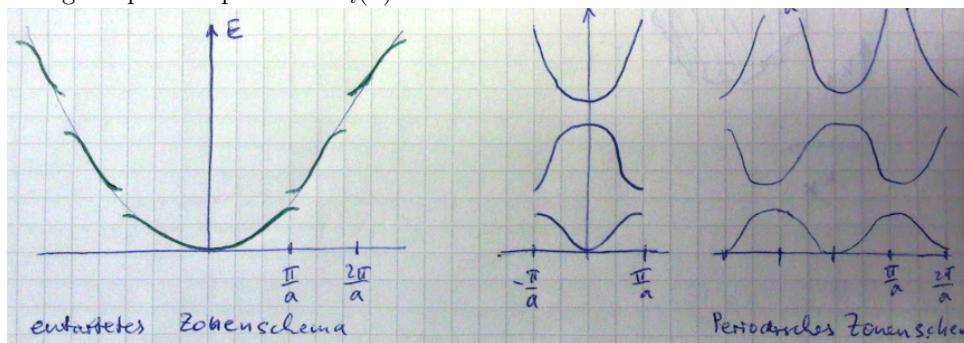
Für ein kubisch primitives Gitter $R_m - R_n = (\pm a, 00), (0 \pm a, 0), (0, a \pm a)$; \Rightarrow Entwickeln für kleine k :

$$E_{k,i} = E_i - \alpha_i - 6\beta_i + \beta_i a^2 k^2$$

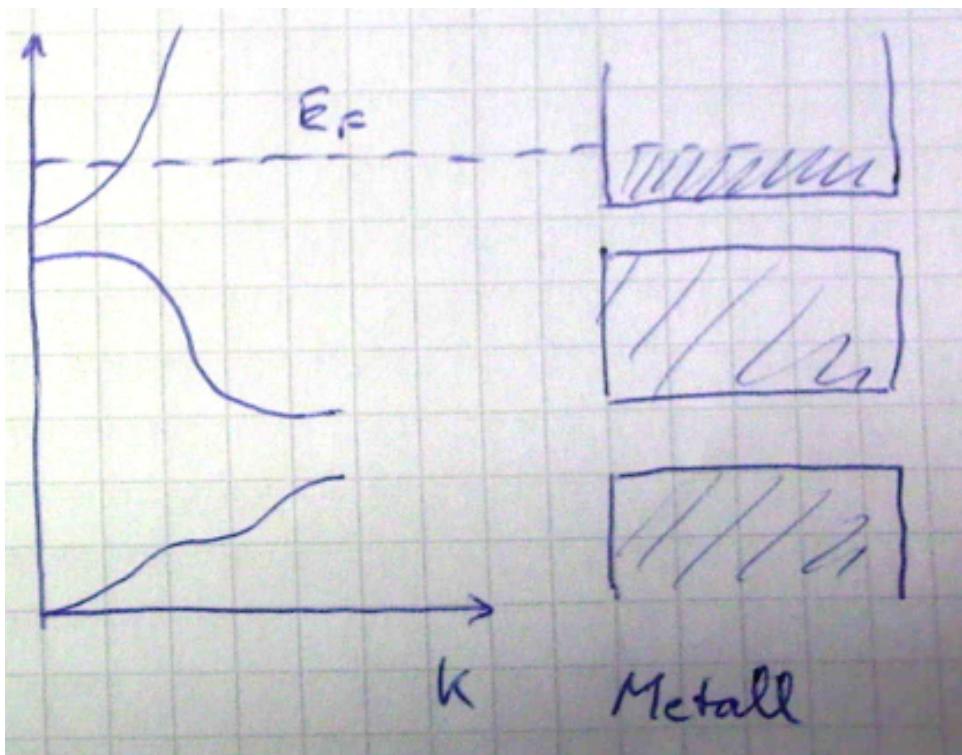


$$E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow m_i^* = \frac{\hbar^2}{2\beta_i a^2}$$

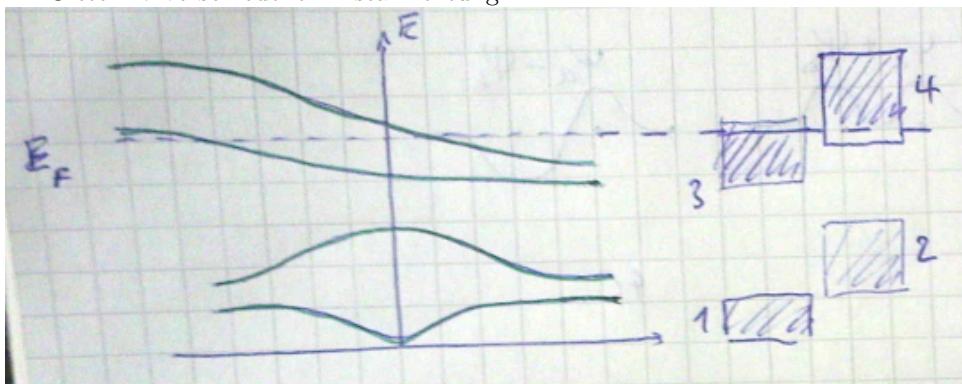
Energiedispersionspektrum $E_i(k)$



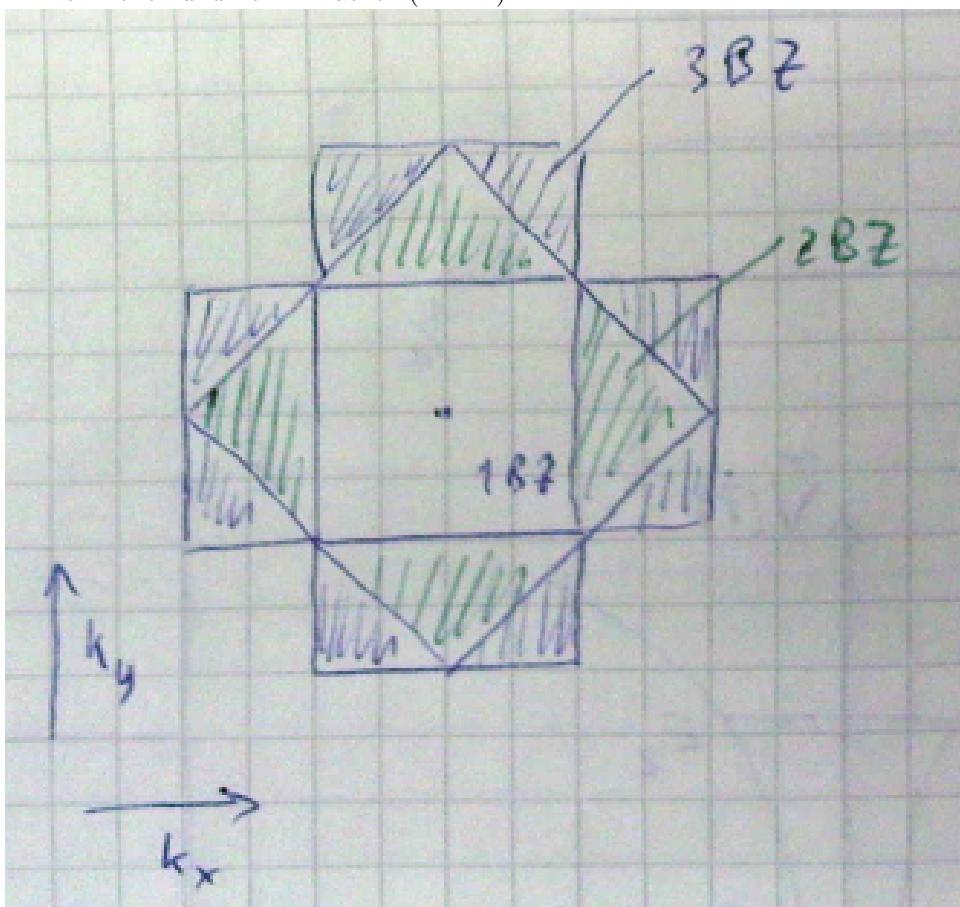
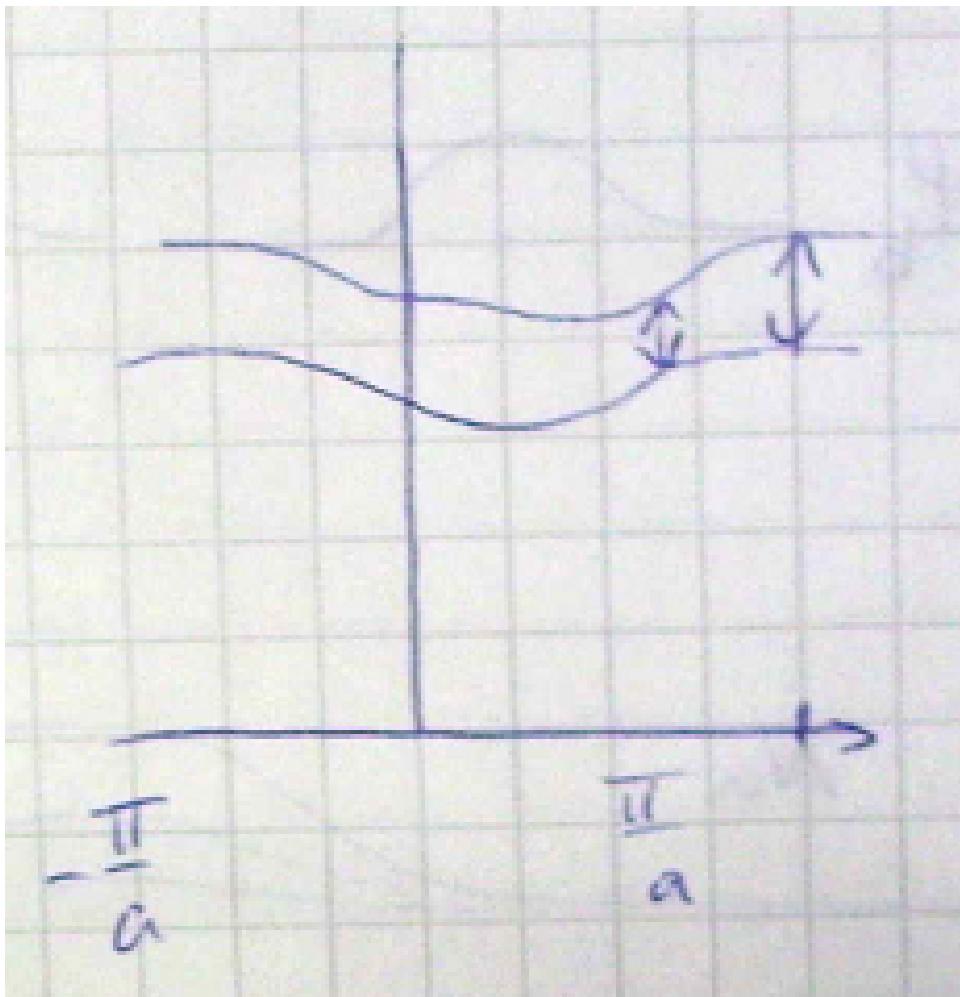
Isolator, $\rho = 10^7 - 10^{14} \Omega m$; $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$



Metall: $\rho = 10^{-4} - 10^{-8} \Omega m$;
2D-Gitter \rightarrow verschiedene Kristallrichtung



Halbmetalle As, Sb(Antimon), Bi



an der zonengrenze (stehende Wellen)

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla} E_{\perp} = 0$$

