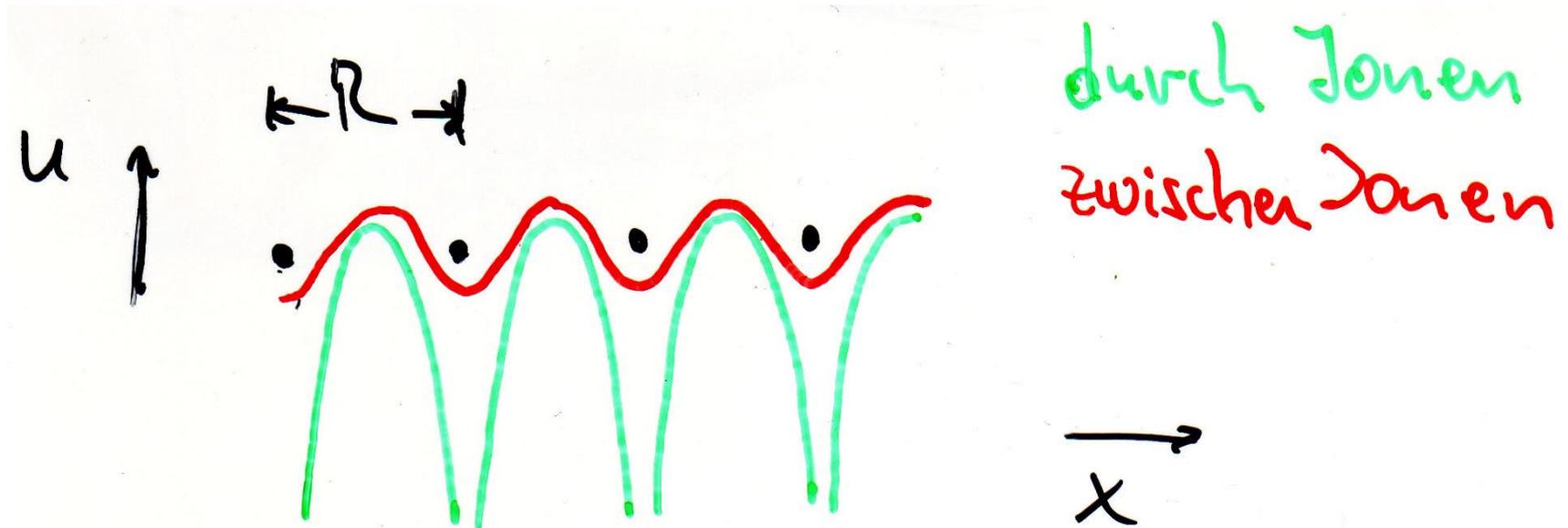


Blochzustände

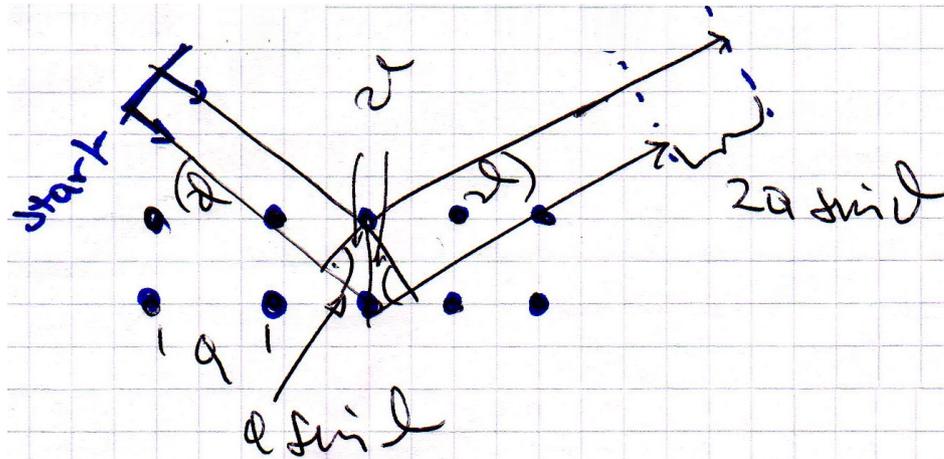
Woher kommen die Bandlücken?



- Eigenschaften von Elektronenzuständen in Bravaisgittern₁
- Modell nahezu freier Elektronen (NFE)

Qualitative Vorüberlegung

Röntgenbeugung: stehende Röntgenwellen



$$n \lambda = 2 a \sin(\theta)$$

Jetzt Elektron im Festkörper:

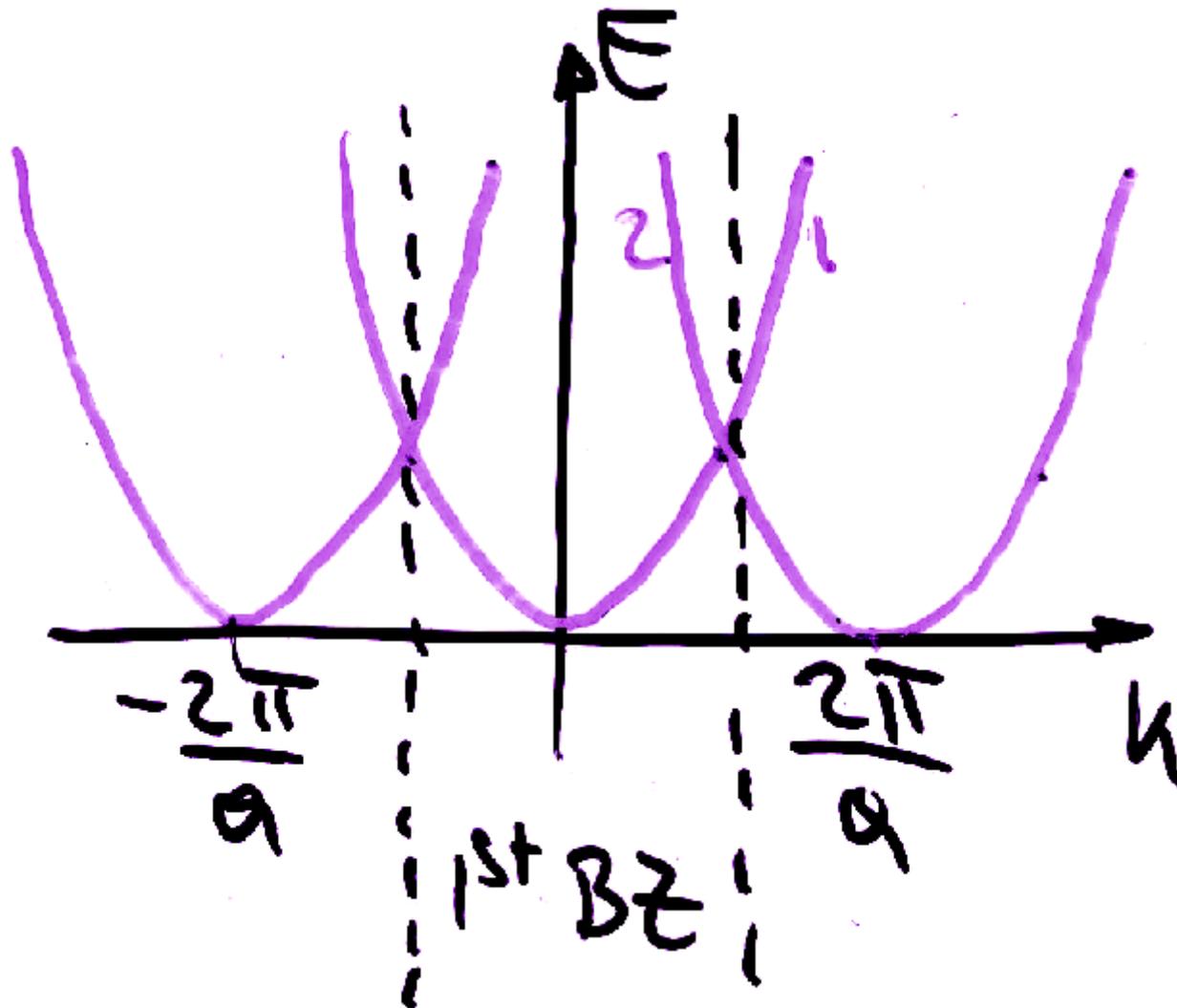
E klein d.h. Elektronen im Inneren der 1. BZ (oder der 2. etc.):

- $\lambda = h / p$ groß → 'spürt' einzelne Ionenrümpfe nicht
- freie Ausbreitung im Kristall
- im k-Raum ist $E = \text{const.}$ auf Freie-Elektronen-Kugelflächen

Wenn aber $\lambda \approx a$ oder k auf Rand einer BZ:

- Bragg Reflektion (wenn Braggbedingung erfüllt)

Beugung entspricht Vervielfachung der Dispersionsparabel
Ränder der Brillouinzonen: Schnittpunkte
bei $|k| = G/2 = \pi/a$: entartete Wellen



Ψ am Rand der BZ ist Superposition mindestens zweier Wellen

sei $V = 0$, dann bei $k = G/2$:

$$\Psi_1 \sim \exp(i G/2 x)$$

$$\Psi_2 \sim \exp(i (G/2 - G) x) = \exp(-i G/2 x)$$

Überlagerungen:

$$\Psi^+ \sim \exp(i G/2 x) + \exp(-i G/2 x) \sim \cos(\pi x/a)$$

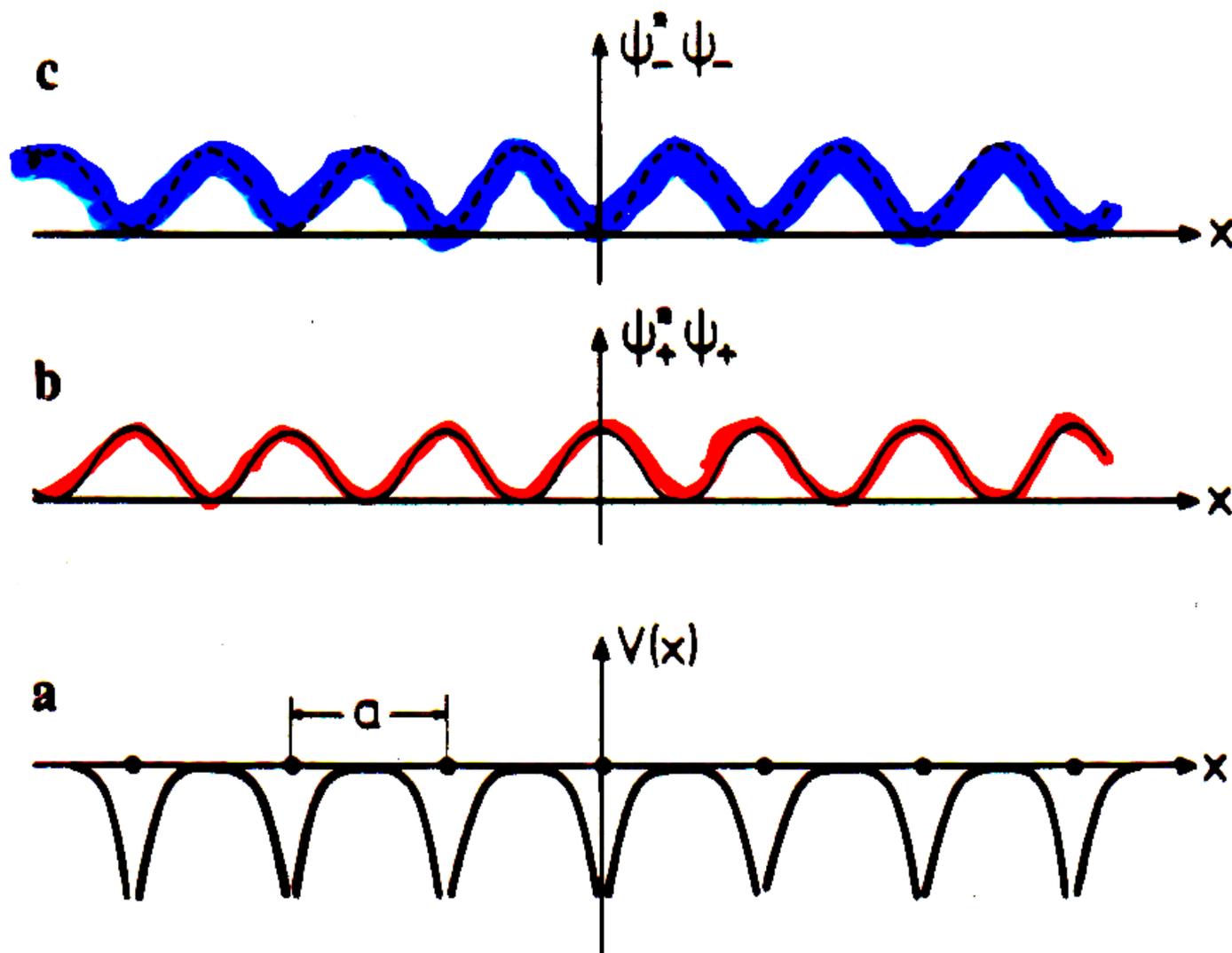
$$\Psi^- \sim \exp(i G/2 x) - \exp(-i G/2 x) \sim \sin(\pi x/a)$$

Ψ^+, Ψ^- sind Stehwellen (vgl. Beugung à la Bragg)

$$\rho^+ \sim |\Psi^+|^2 \sim \cos^2(\pi x/a)$$

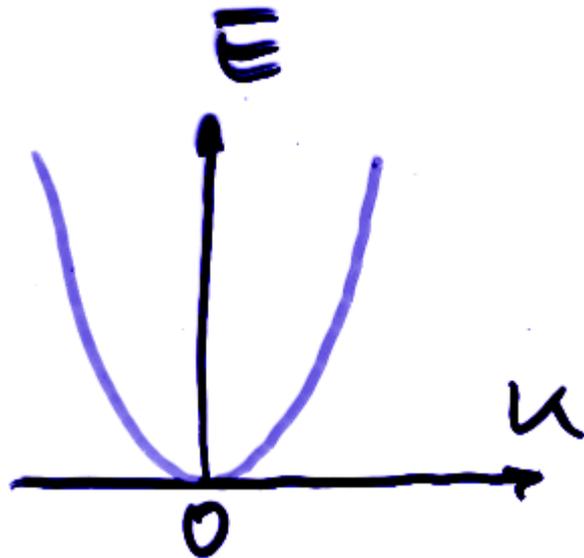
$$\rho^- \sim |\Psi^-|^2 \sim \sin^2(\pi x/a)$$

$E^+ < E^-$ oder $E^- < E^+$??

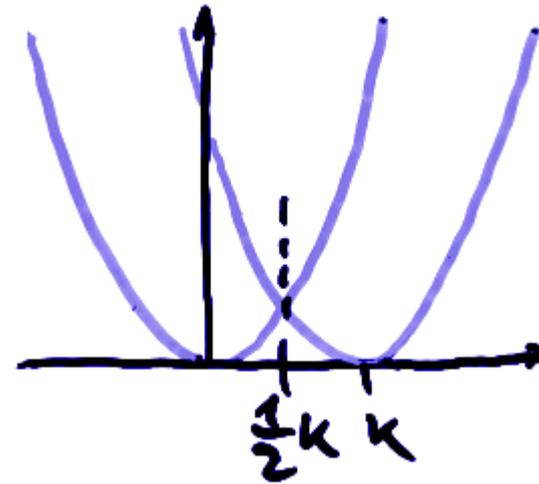


- Ψ^+ : charge density largest at cores
 - Ψ^- : " " " between "
- Ψ^+ has lower energy than Ψ^-
- ⇒ energy gap + bands

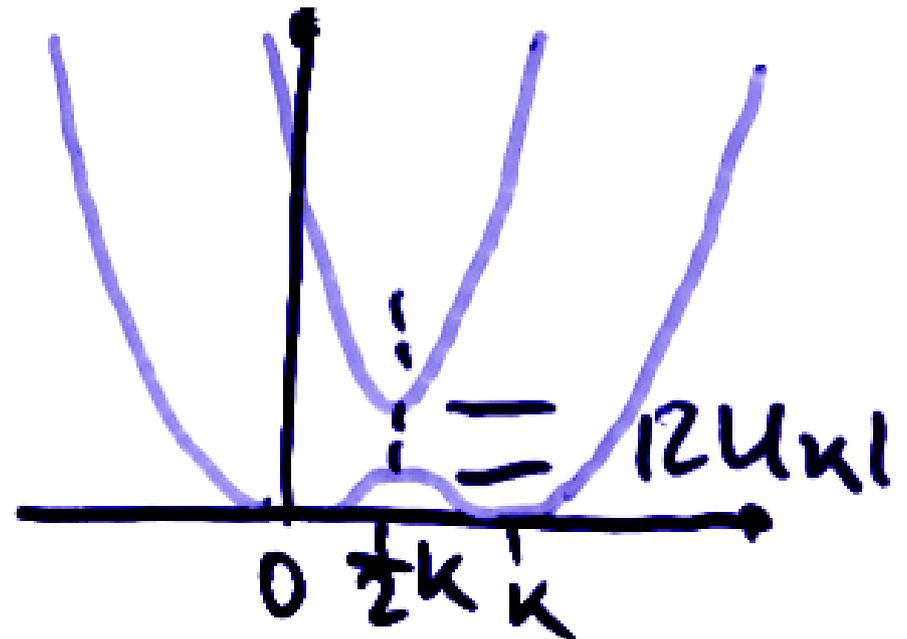
Free electrons



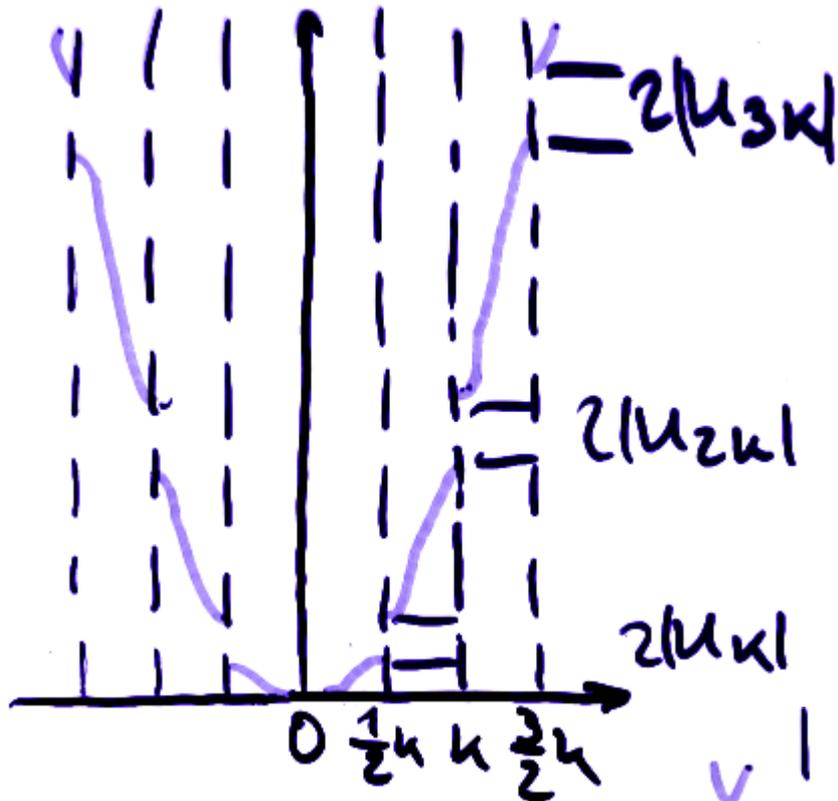
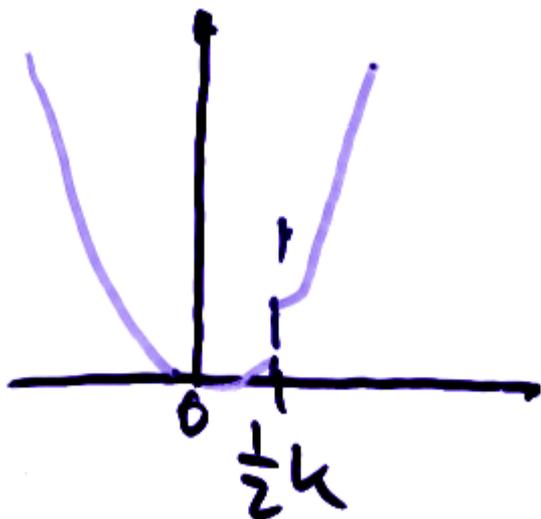
Periodic potential ≈ 0



Potential $\neq 0$
Degeneracy lifted
 $E(k) \perp$ BZ edge

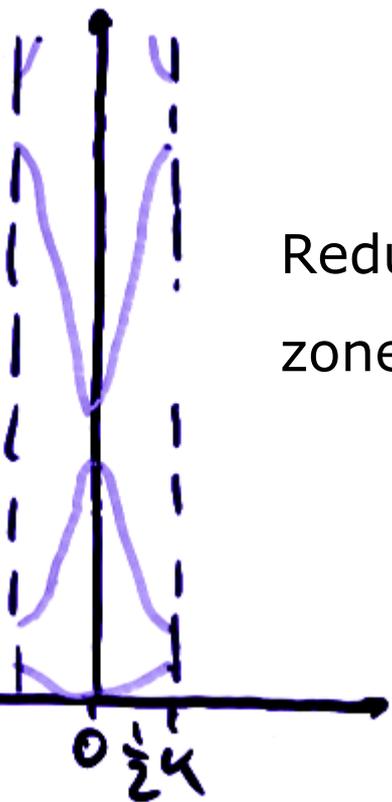


Effect of G on E(k)



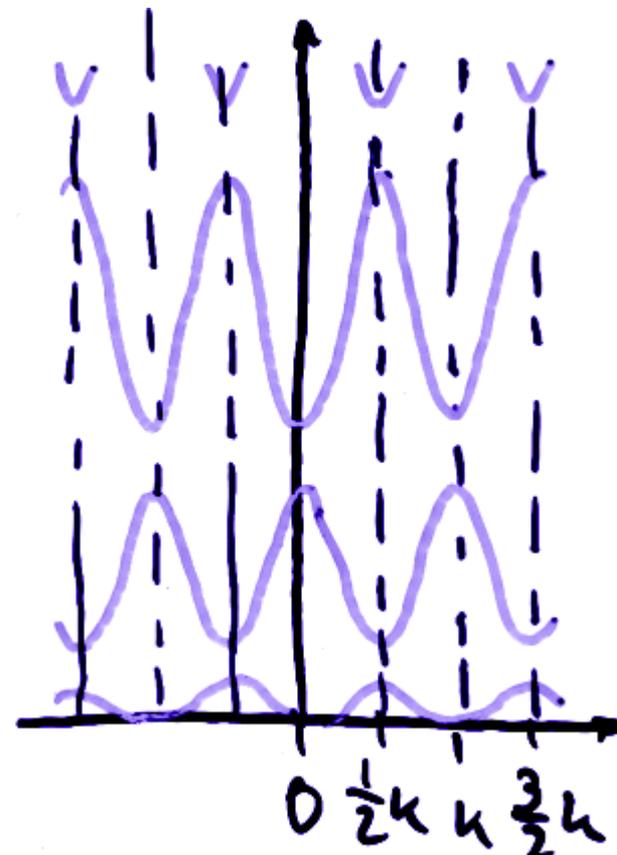
Effect of 2G, 3G ... on E(k)

Gap
Band
Gap
Band
Gap
Band



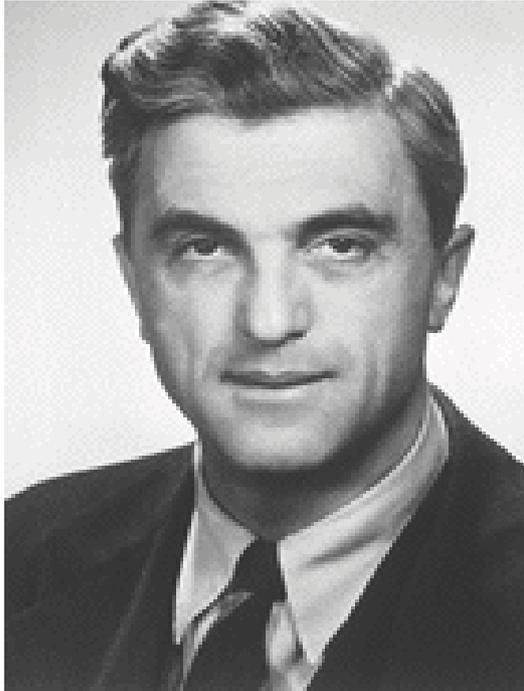
Reduced zone scheme

repeated zone scheme



Formalere Beschreibung: Elektronen in einem gitterperiodischen Potential

Felix Bloch (1905 – 1983), Nobelpreis für Physik 1952



Geboren in Zürich

1924 bis 1927 Studium ETHZ

Wechsel zur Universität Leipzig bei Werner Heisenberg

1928 Doktorarbeit zum Verhalten von Elektronen in Kristallgittern

Assistent bei Pauli in Zürich

1929 Niederlande, 1931 Kopenhagen mit Bohr

1931 Sowjetunion

1932 Habilitation, Assistent bei Heisenberg in Leipzig

1933 emigriert (CH, diverse europäische Länder)

1934 USA, Stanford University bis 1971

Manhattan-Projekt

Radar-Technik

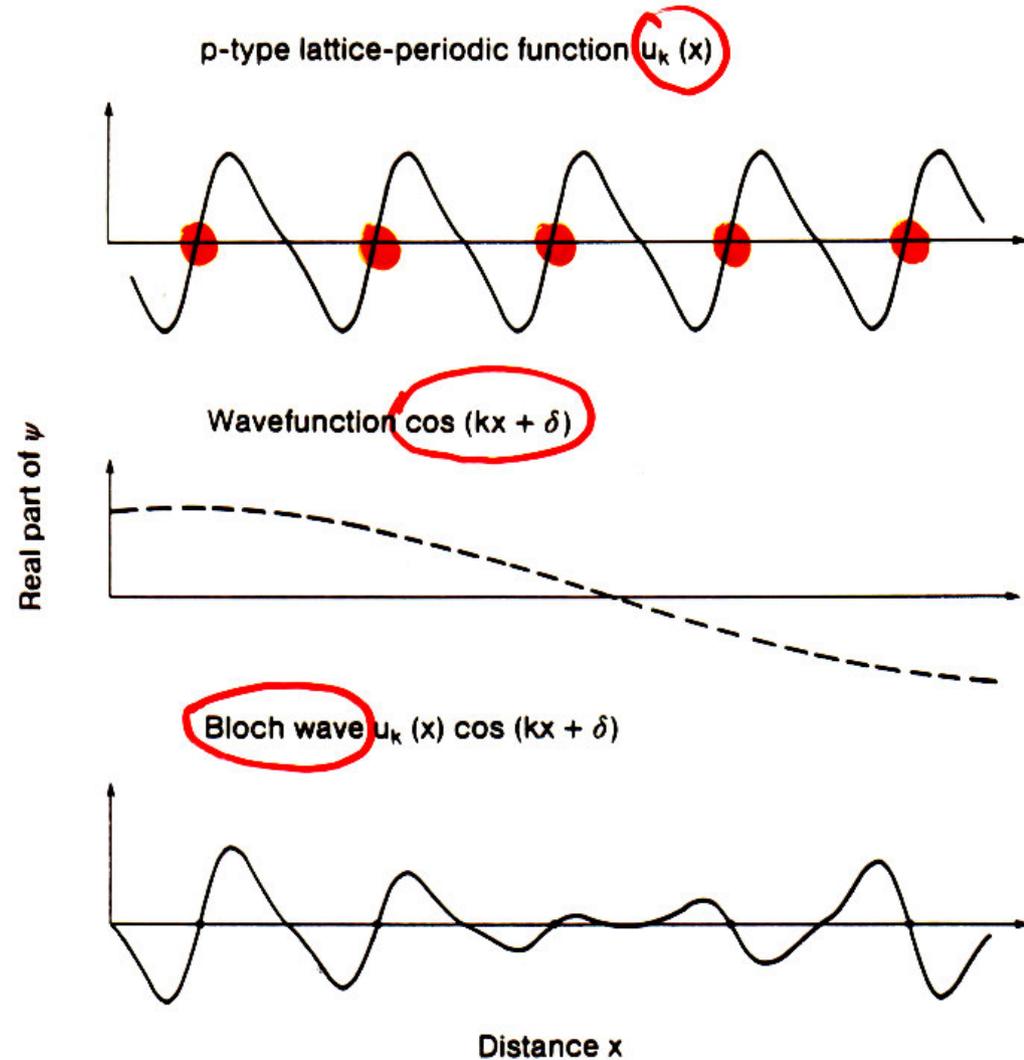
Nach 2. Weltkrieg: Ferromagnetismus

1946 mit W.W. Hansen & M.E. Packard: NMR

dafür 1952 Nobelpreis

1954/1955 erster Generaldirektor des CERN

Ein Blochzustand

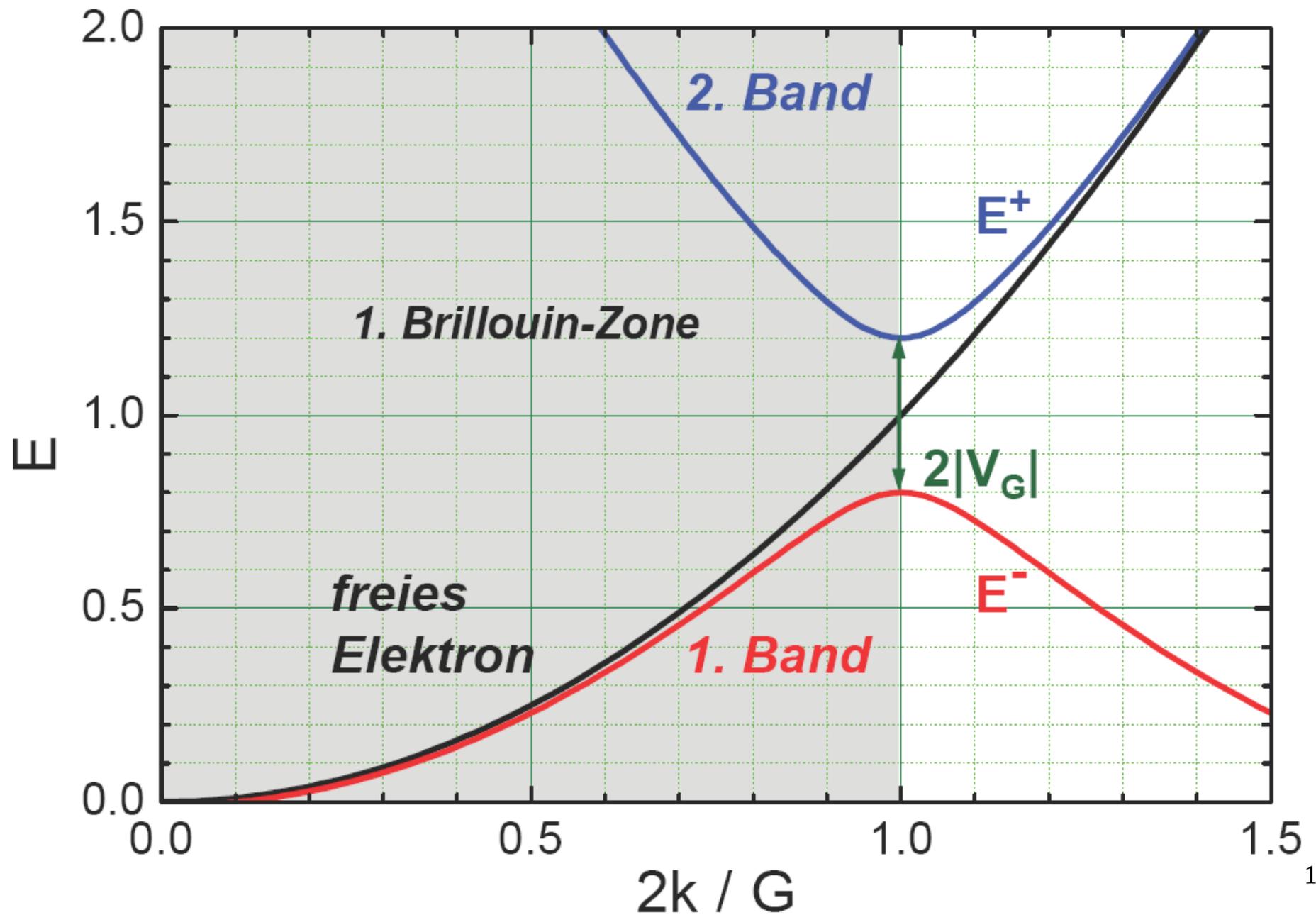


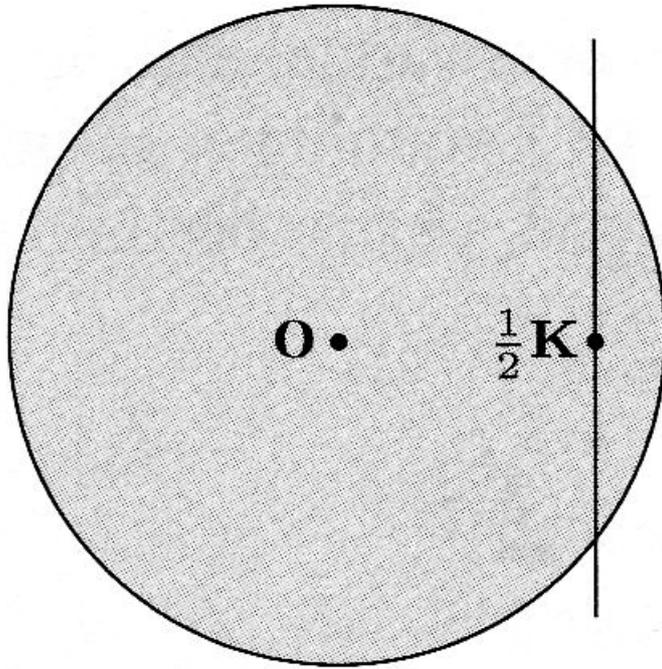
(Dieses Bild zeigt den Realteil.)

Beachte aber $|\psi_{nk}| = |\exp(ikr)| |u_{nk}(r)| = |u_{nk}(r)|$.

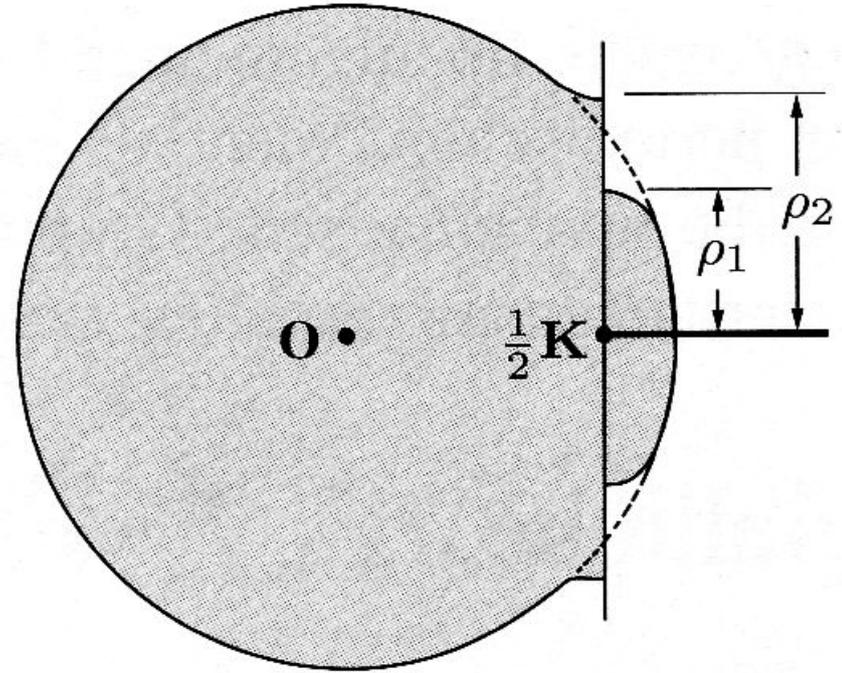
$\exp(ikr)$ moduliert die Phase von Zelle zu Zelle, nicht den Betrag.)

Dispersion am Rand der 1. BZ



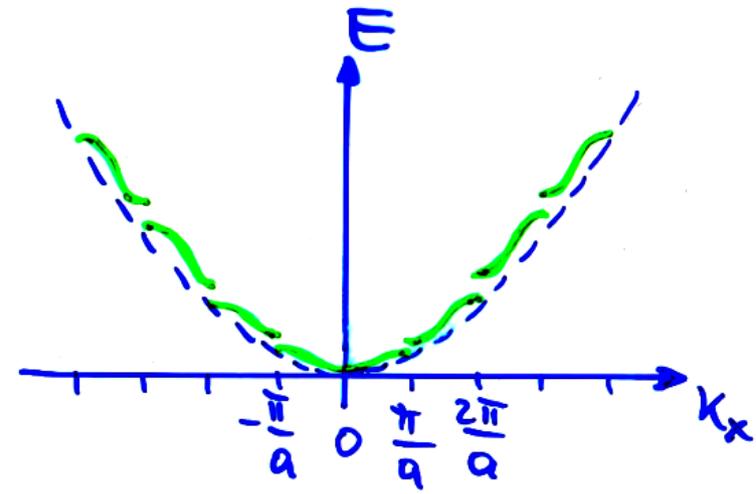


Braggebene bei $\frac{1}{2} K$ schneidet
Fermikugel freier Elektronen



Resultierende Verformung

Gruppengeschwindigkeit



$$\hbar v_g = \frac{dE}{dk}$$

