

## Übungsaufgaben zur

**Festkörperphysik I, WS 2010/2011****7 Das freie Elektronengas****7.7 Elektronische spezifische Wärmekapazität von Kupfer**

1. Berechnen Sie im Modell freier Elektronen für Kupfer den elektronischen Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität  $C_{V\text{el}}$  bei der Temperatur  $T = 300$  K.
2. Schätzen Sie den Beitrag der Phononen  $C_{V\text{ph}}$  bei dieser Temperatur ab.
3. Bei welcher Temperatur gilt  $C_{V\text{el}}(T) = C_{V\text{ph}}(T)$ ?
4. Berechnen Sie für Kupfer die Sommerfeld–Konstante  $\gamma = C_{V\text{el}}(T)/T$  und vergleichen Sie diese mit dem experimentell ermittelten Wert  $\gamma_{\text{exp}} = 97.53\text{J/m}^3\text{K}^2$ . [Dichte  $n = N/V = 8.45 \cdot 10^{28}\text{m}^{-3}$ , Debye–Temperatur  $\theta_D = 343\text{K}$ ]

**7.8 Ladungstransport bei Vorhandensein von zwei Ladungsträgersorten**

Betrachten Sie ein metallisches System mit zwei Ladungsträgersorten. Die Ladungsträger sollen die gleiche Dichte  $n$  aber entgegengesetzte Ladung ( $q_1 = e$  und  $q_2 = -e$ ) und ferner unterschiedliche Massen  $m_1$  und  $m_2$  sowie unterschiedliche Streuzeiten  $\tau_1$  und  $\tau_2$  besitzen.

Berechnen Sie

1. den Hall–Koeffizienten  $R_H$  und
2. den Magnetwiderstand  $\Delta\rho(B_z) = \rho(B_z) - \rho(0)$ , wobei  $B_z$  das in der  $z$ –Richtung angelegte Magnetfeld ist. Das magnetische Feld  $B_z$  sei genügend klein, so dass die Zyklotronfrequenz  $\omega_c = eB_z/m$  wesentlich kleiner ist als die elektronische Relaxationsrate  $1/\tau$ .

**8 Energiebänder****8.1 Ebenes quadratisches Gitter**

1. Betrachten Sie ein einfaches quadratisches Gitter in zwei Dimensionen. Zeigen Sie, dass die kinetische Energie eines freien Elektrons an einer Ecke der ersten Brillouin–Zone doppelt so groß ist wie die eines Elektrons im Mittelpunkt einer Seitenfläche der Zone.

2. Wie groß ist dieses Verhältnis für ein einfaches kubisches Gitter in drei Dimensionen?
3. Welche Bedeutung könnte das Ergebnis von 2.) für die elektrische Leitfähigkeit von zweiwertigen Metallen haben?
4. Konstruieren Sie die ersten drei Brillouin-Zonen eines ebenen quadratischen Gitters und markieren Sie für die ersten drei Energiebänder eines zweidimensionalen freien Elektronengases die von den Elektronen besetzten Zustände. Nehmen Sie dazu die Energiedispersion

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

von freien Elektronen und den Radius der Fermi-Kugel zu  $k_F = 1.2\pi/a$  an. Was ändert sich, wenn anstelle eines freien Elektronengases ein Elektronengas betrachtet wird, welches sich in einem schwachen periodischen Potential befindet?

## Lösungen der Übungsaufgaben zur

**Festkörperphysik I, WS 2010/2011****7 Das freie Elektronengas****7.7 Elektronische spezifische Wärmekapazität von Kupfer**

1. Der elektronische Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität lautet (vgl. Vorlesung):

$$C_{V\text{el}}(T) = \frac{\pi^2}{3} \underbrace{N_F}_{\frac{3}{2} \frac{n}{\mu}} k_B^2 T = \frac{\pi^2}{2} n \frac{k_B^2 T}{\mu} = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F}$$

Um an die in der Vorlesung verwendete Notation anzuknüpfen, sei darauf hingewiesen, dass  $N_F \equiv D(\epsilon_F)/V$ . Die Fermitemperatur  $T_F$  lässt sich aus der Dichte  $n$  berechnen. Das Resultat lautet

$$T_F = \frac{\mu(0)}{k_B} = \frac{\hbar^2}{2mk_B} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} = 8.1487 \cdot 10^4 \text{K}$$

Daraus ergibt sich sofort

$$C_{V\text{el}}(T) = 7.065 \cdot 10^1 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}} \cdot T[\text{K}]$$

bei  $T = 300\text{K}$  hat man schließlich

$$C_{V\text{el}}(T = 300\text{K}) = 2.12 \cdot 10^4 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}}$$

2. Als nächstes schätzen wir den Phononen–Beitrag zur spezifischen Wärmekapazität ab. Bei  $T = \theta_D$  gilt die klassische Näherung

$$C_{V\text{ph}}(T = \theta_D) = 3nk_B = 3.5 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}}$$

Bei  $T = 300\text{K}$  ergibt sich als Verhältnis der beiden spezifischen Wärmen

$$\frac{C_{V\text{el}}(T = 300\text{K})}{C_{V\text{ph}}} = 0.606 \cdot 10^{-2}$$

3. Die Temperatur  $T_0$ , bei der die Beiträge zur spezifischen Wärme von den Phononen und den Elektronen übereinstimmen, kann wie folgt aus dem Tieftemperaturlimit von  $C_{V\text{ph}}$  abgeschätzt werden:

$$C_{V\text{ph}}(T_0) \stackrel{T \ll \theta_D}{=} \frac{12}{5} \pi^4 n k_B \left( \frac{T_0}{\theta_D} \right)^3 = C_{V\text{el}}(T_0) = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T_0}{T_F}$$

Daraus ergibt sich, daß beide spezifischen Wärmen übereinstimmen bei

$$T_0^2 = \theta_D^2 \cdot \frac{5}{24\pi^2} \frac{\theta_D}{T_F} \approx (3.233\text{K})^2$$

d. h. bei  $T_0 = 3.233\text{K}$ .

4. Die Sommerfeld–Konstante für Kupfer ergibt sich aus

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{C_{V\text{el}}(T)}{T} = 70.65 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}^2} \\ \gamma_{\text{exp}} &= 97.53 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}^2} \end{aligned}$$

Die Diskrepanz zwischen den beiden Resultaten rührt daher, dass die Elektronen nicht wirklich *frei* sind, wie es im Sommerfeld–Modell angenommen wird. Bandstruktur- und (Fermiflüssigkeits-) Wechselwirkungs-Effekte lassen sich jedoch manchmal in einer renormierten effektiven („*thermischen*“) Masse  $m^*$  zusammenfassen:

$$\begin{aligned} T_F^* &= \frac{\epsilon_F^*}{k_B} = \frac{\hbar^2}{2m^* k_B} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} = \frac{m}{m^*} T_F^{\text{frei}} \\ \gamma^* &= \frac{m^*}{m} \gamma^{\text{frei}} \end{aligned}$$

Für Cu würde man dann erhalten (vgl. Vorlesung):

$$m^* = 1.337m$$

## 7.8 Ladungstransport bei Vorhandensein von zwei Ladungsträgersorten

Zu Beginn sei hier noch einmal kurz auf die Ableitung des gewöhnlichen Hall–Effektes im Rahmen des Drude–Modells eingegangen. In Gegenwart eines Magnetfeldes  $\mathbf{B}$  (Lorentz–Kraft) verallgemeinert sich die Relaxationsgleichung für die elektronische Stromdichte  $\mathbf{j}_e$  (vgl. Übungsblatt 11, Aufgabe 7.5) zu

$$\left[ -i\omega + \frac{1}{\tau} \right] \mathbf{j}_e = \frac{ne^2}{m} [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]$$

wobei wir eine harmonische Zeitabhängigkeit ( $\partial/\partial t \rightarrow -i\omega$ ) der Felder angenommen haben. Durch die Einführung der vektoriellen Zyklotronfrequenz

$$\boldsymbol{\omega}_c = \frac{e\mathbf{B}}{m}$$

vereinfacht sich dies mit ( $\mathbf{j}_e = en\mathbf{v}$ ) zu:

$$\left[ -i\omega + \frac{1}{\tau} \right] \mathbf{j}_e + \boldsymbol{\omega}_c \times \mathbf{j}_e = \frac{ne^2}{m} \mathbf{E}$$

Im Limes  $\omega\tau \rightarrow 0$  lässt sich diese Relaxationsgleichung auf die Form bringen

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_e &= \sigma_0 \mathbf{E} + \mathbf{j}_e \times \mathbf{s}_c \\ \sigma_0 &= \frac{ne^2\tau}{m} \\ \mathbf{s}_c &= \boldsymbol{\omega}_c \tau\end{aligned}$$

Diese Gleichung lässt sich einfach lösen, indem man das vektorielle Produkt

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_e \times \mathbf{s}_c &= \sigma_0 \mathbf{E} \times \mathbf{s}_c + (\mathbf{j}_e \times \mathbf{s}_c) \times \mathbf{s}_c \\ &= \sigma_0 \mathbf{E} \times \mathbf{s}_c - s_c^2 \mathbf{j}_e + \mathbf{s}_c (\mathbf{s}_c \cdot \mathbf{j}_e)\end{aligned}$$

berechnet. Dies führt sofort auf das Resultat

$$\mathbf{j}_e = \frac{\sigma_0}{1 + s_c^2} \{ \mathbf{E} - \mathbf{s}_c \times \mathbf{E} + \mathbf{s}_c (\mathbf{s}_c \cdot \mathbf{E}) \} \stackrel{\mathbf{B}=B_z \hat{\mathbf{z}}}{=} \frac{\sigma_0}{1 + s_c^2} \begin{pmatrix} 1 & s_c & 0 \\ -s_c & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + s_c^2 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{E}$$

wobei  $s_c = eB_z\tau/m = \omega_c\tau$  definiert wurde. Für den Hall-Effekt ist der transversale Strom relevant:

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_{e\perp} &= \begin{pmatrix} j_{ex} \\ j_{ey} \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1 + s_c^2} \begin{pmatrix} 1 & s_c \\ -s_c & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{E}_\perp = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}_\perp \\ \sigma_{xx} &= \sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{1 + s_c^2} \quad ; \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{\sigma_0 s_c}{1 + s_c^2}\end{aligned}$$

Der inverse Zusammenhang zwischen  $\mathbf{E}_\perp$  und  $\mathbf{j}_{e\perp}$  lautet

$$\mathbf{E}_\perp = \boldsymbol{\sigma}^{-1} \cdot \mathbf{j}_{e\perp} =: \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{j}_{e\perp}$$

Dies definiert den Widerstandstensor

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho} &= \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{|\boldsymbol{\sigma}|} \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{xy} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} \\ |\boldsymbol{\sigma}| &= \sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx} = \sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2\end{aligned}$$

Zur Diskussion des Hall-Effektes tragen nun die folgenden relevanten Größe bei:

1. Das Hall-Feld  $E_y$ , welches man unter der Bedingung  $j_{ey} = 0$  bekommt:

$$E_y = \rho_{yx} j_{ex} \quad ; \quad \rho_{yx} = -\frac{\sigma_{yx}}{|\boldsymbol{\sigma}|} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} =: R_H B_z$$

Diese Relation definiert den Hall-Koeffizienten

$$R_H = \frac{\rho_{yx}}{B_z} = \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

Durch Einsetzen von  $\sigma_{xx}$  und  $\sigma_{xy}$  findet man für den Hall-Koeffizienten

$$R_H = \frac{s_c}{\sigma_0 B_z} = \frac{\mu}{\sigma_0} = \frac{1}{ne} \quad ; \quad \mu = \frac{|e|\tau}{m}$$

Hier bezeichnet  $\mu$  die *Beweglichkeit* der Ladungsträger.

2. Der diagonale Widerstand  $\rho_{xx}$  ist definiert durch

$$E_x = \rho_{xx} j_{ex} ; \quad \rho_{xx} = -\frac{\sigma_{yy}}{|\boldsymbol{\sigma}|} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

Durch Einsetzen von  $\sigma_{xx}$  und  $\sigma_{xy}$  findet man für  $\rho_{xx}$  das bekannte Resultat

$$\rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0}$$

d. h.  $\rho_{xx}$  hängt für eine Ladungsträgersorte nicht vom Magnetfeld ab.

Betrachten wir nun den Fall, dass in einem System zwei Ladungsträgersorten vorhanden sind, die durch die Größen  $n_i, q_i, m_i$  und  $\tau_i$ ,  $i = 1, 2$  charakterisiert sind. In diesem Fall lassen sich alle bisher abgeleiteten Resultate verallgemeinern, indem man identifiziert

$$\mathbf{j}_{e\perp} = \mathbf{j}_{e1\perp} + \mathbf{j}_{e2\perp} = (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{E}_{\perp}$$

1. Der Hall-Koeffizient lautet dann

$$R_H = \frac{1}{B_z} \frac{\sum_i \sigma_{ixy}}{(\sum_i \sigma_{ixx})^2 + (\sum_i \sigma_{ixy})^2}$$

Setzt man die Ausdrücke für  $\sigma_{ixx}$  und  $\sigma_{ixy}$  ein und beschränkt sich auf die führende Ordnung in der kleinen Größe  $s_c = \omega_c \tau$ , so erhält man

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{1}{B_z} \frac{\sum_i \sigma_{0i} s_{ci}}{\sum_i \sigma_{0i}} \\ \sigma_{0i} &= \frac{n_i q_i^2 \tau_i}{m_i} ; \quad s_{ci} = \omega_{ci} \tau_i = \frac{q_i B_z}{m_i} \tau_i = \mu_i B_z \end{aligned}$$

Hier haben wir die Beweglichkeiten

$$\mu_i = \frac{|q_i| \tau_i}{m_i} ; \quad i = 1, 2$$

eingeführt. Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{1}{B_z} \frac{\sigma_{01} \mu_1 + \sigma_{02} \mu_2}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} B_z = \frac{\sigma_{01}^2 \overbrace{\mu_1}^{R_{H1}} + \sigma_{02}^2 \overbrace{\mu_2}^{R_{H2}}}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} \\ &= \frac{R_{H1} \sigma_{01}^2 + R_{H2} \sigma_{02}^2}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} = \frac{R_{H1} \frac{\sigma_{01}^2}{\sigma_{01} \sigma_{02}} + R_{H2} \frac{\sigma_{02}^2}{\sigma_{01} \sigma_{02}}}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2 / (\sigma_{01} \sigma_{02})} \\ &= \frac{R_{H1} \rho_{02}^2 + R_{H2} \rho_{01}^2}{(\rho_{01} + \rho_{02})^2} ; \quad \rho_{0i} = 1/\sigma_{0i} ; \quad R_{Hi} = \frac{1}{n_i q_i} \end{aligned}$$

Drückt man die Leitfähigkeiten der beiden Ladungsträgersorten  $\sigma_{0i}$  durch die Beweglichkeiten  $\mu_i$  aus, d. h.  $\sigma_{0i} = n_i |q_i| \mu_i$ , so kann man schreiben

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{R_{H1} n_1^2 q_1^2 \mu_1^2 + R_{H2} n_2^2 q_2^2 \mu_2^2}{(n_1 |q_1| \mu_1 + n_2 |q_2| \mu_2)^2} \\ \underline{n_1 = n_2 = n} \quad & \frac{R_{H1} q_1^2 \mu_1^2 + R_{H2} q_2^2 \mu_2^2}{(|q_1| \mu_1 + |q_2| \mu_2)^2} \\ \underline{q_1 = -q_2 = e} \quad & \frac{1}{ne} \frac{\mu_1^2 - \mu_2^2}{(\mu_1 + \mu_2)^2} \end{aligned}$$

Man erkennt somit, dass Der Hall-Koeffizient  $R_H$  für den Fall  $n_1 = n_2, q_1 = -q_2$  verschwindet, wenn die Beweglichkeiten der beiden Ladungsträgersorten gleich sind. Dieses Ergebnis haben wir natürlich intuitiv erwartet.

2. Schließlich berechnen wir die Magnetfeld-Abhängigkeit des diagonalen Widerstands  $\rho_{xx}$ , die wie folgt definiert werden kann:

$$\begin{aligned}\Delta\rho(B_z) &= \rho_{xx}(B_z) - \rho_{xx}(0) \\ &= \frac{\sum_i \sigma_{ixx}}{(\sum_i \sigma_{ixx})^2 + (\sum_i \sigma_{ixy})^2} - \frac{1}{\sum_i \sigma_{ixx}(0)}\end{aligned}$$

Zur Vereinfachung der Rechnung definieren wir

$$\tilde{\sigma}_{0i} = \frac{\sigma_{0i}}{1 + s_{ci}^2} \quad ; \quad i = 1, 2$$

und erhalten

$$\begin{aligned}\Delta\rho(B_z) &= \frac{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2 + (\tilde{\sigma}_{01}s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2})^2} - \frac{1}{\sigma_{01} + \sigma_{02}} \\ &= \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02} + \frac{(\tilde{\sigma}_{01}s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2})^2}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}}} - \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02} + \tilde{\sigma}_{01}s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2}^2} \\ &= \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}} \left\{ \frac{1}{1 + \frac{(\tilde{\sigma}_{01}s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}} - \frac{1}{1 + \frac{\tilde{\sigma}_{01}s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2}^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}} \right\} \\ &= \frac{1}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}} \frac{\frac{\tilde{\sigma}_{01}s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2}^2}{\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02}} - \frac{(\tilde{\sigma}_{01}s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}}{\left(1 + \frac{(\tilde{\sigma}_{01}s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}\right) \left(1 + \frac{\tilde{\sigma}_{01}s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2}^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}\right)} \\ &= \frac{\tilde{\sigma}_{01}\tilde{\sigma}_{02}(s_{c1} - s_{c1})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^3} \frac{1}{\left(1 + \frac{(\tilde{\sigma}_{01}s_{c1} + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2})^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}\right) \left(1 + \frac{\tilde{\sigma}_{01}s_{c1}^2 + \tilde{\sigma}_{02}s_{c2}^2}{(\tilde{\sigma}_{01} + \tilde{\sigma}_{02})^2}\right)} \\ &\stackrel{s_{ci} \ll 1}{=} \frac{\sigma_{01}\sigma_{02}(s_{c1} - s_{c1})^2}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^3} = \frac{1}{\sigma_{01} + \sigma_{02}} \frac{\sigma_{01}\sigma_{02}}{(\sigma_{01} + \sigma_{02})^2} (\mu_1 - \mu_2)^2 B_z^2\end{aligned}$$

Dieses Resultat lässt sich noch ein wenig umformen, indem man die Widerstände

$$\begin{aligned}\rho_{0i} &= \frac{1}{\sigma_{0i}} \quad ; \quad i = 1, 2 \\ \rho_0 &= \frac{1}{\sigma_{01} + \sigma_{02}} = \frac{\rho_{01}\rho_{02}}{\rho_{01} + \rho_{02}}\end{aligned}$$

eingführt. Dann erhält man als Resultat

$$\Delta\rho(B_z) = \rho_0 \frac{\rho_{01}\rho_{02}}{(\rho_{01} + \rho_{02})^2} (\mu_1 - \mu_2)^2 B_z^2$$

Wir sehen, dass der Magnetwiderstand immer positiv ist und für kleine Felder proportional zu  $B_z^2$  ansteigt. Für  $\mu_1 = \mu_2$  verschwindet der Magnetwiderstand.

## 8 Energiebänder

### 8.1 Ebenes quadratisches Gitter

1. Die Brillouin-Zone eines zweidimensionalen quadratischen Gitters mit Gitterkonstante  $a$  ist wiederum ein Quadrat mit Seitenlänge  $2\pi/a$ . Die Länge des Wellenvektors vom Zentrum des Quadrats zu einer Ecke ist um einen Faktor  $\sqrt{2}$  länger als der Wellenvektor vom Zentrum zur Mitte einer Seite. Das heißt, es gilt  $k_{\text{Ecke}} = \sqrt{2}k_{\text{Mitte}}$ . Für ein freies Elektron ist die kinetische Energie gegeben durch

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

d.h. die kinetische Energie ist proportional zu  $\mathbf{k}^2$ . Damit ist die kinetische Energie eines Elektrons mit einem  $\mathbf{k}$ -Vektor vom Zentrum zu einer Ecke der 1. Brillouin-Zone um einen Faktor 2 größer als die kinetische Energie eines Elektrons mit einem  $\mathbf{k}$ -Vektor vom Zentrum zum Mittelpunkt einer Seitenfläche.

2. Die 1. Brillouin-Zone eines einfach kubischen Gitters ist ein Würfel. Für einen Würfel gilt natürlich, dass ein  $\mathbf{k}$ -Vektor vom Mittelpunkt des Würfels zu einer Würfecke um einen Faktor  $\sqrt{3}$  größer ist als ein Vektor vom Zentrum zum Mittelpunkt einer Seitenfläche. Damit ist die Energie des entsprechenden Elektrons dann auch 3 mal so groß.
3. Wir überlegen zuerst nochmals, wie viele Zustände wir pro Energieband haben. Diese Zahl ist durch die Anzahl der durch die Randbedingungen (endliches Kristallvolumen) erlaubten  $\mathbf{k}$ -Vektoren in der 1. Brillouin-Zone gegeben. Für einen einfach kubischen Kristall ist das Volumen der 1. Brillouin-Zone gerade  $(2\pi/a)^3$ . Ein Zustand nimmt im  $\mathbf{k}$ -Raum das Volumen  $(2\pi)^3/V$  ein, wobei  $V$  das Volumen des betrachteten Kristalls ist. Die Zahl der erlaubten  $\mathbf{k}$ -Werte in der 1. Brillouin-Zone ist damit

$$N = \frac{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3}{\frac{(2\pi)^3}{V}} = \frac{V}{a^3} = \frac{V}{V_{\text{Zelle}}}$$

Wir sehen, dass die Zahl der möglichen Zustände gerade durch die Anzahl der Einheitszellen in dem betrachteten Kristall gegeben ist. Wegen der Spinartung haben wir dann insgesamt  $2N$  Zustände pro Energieband.

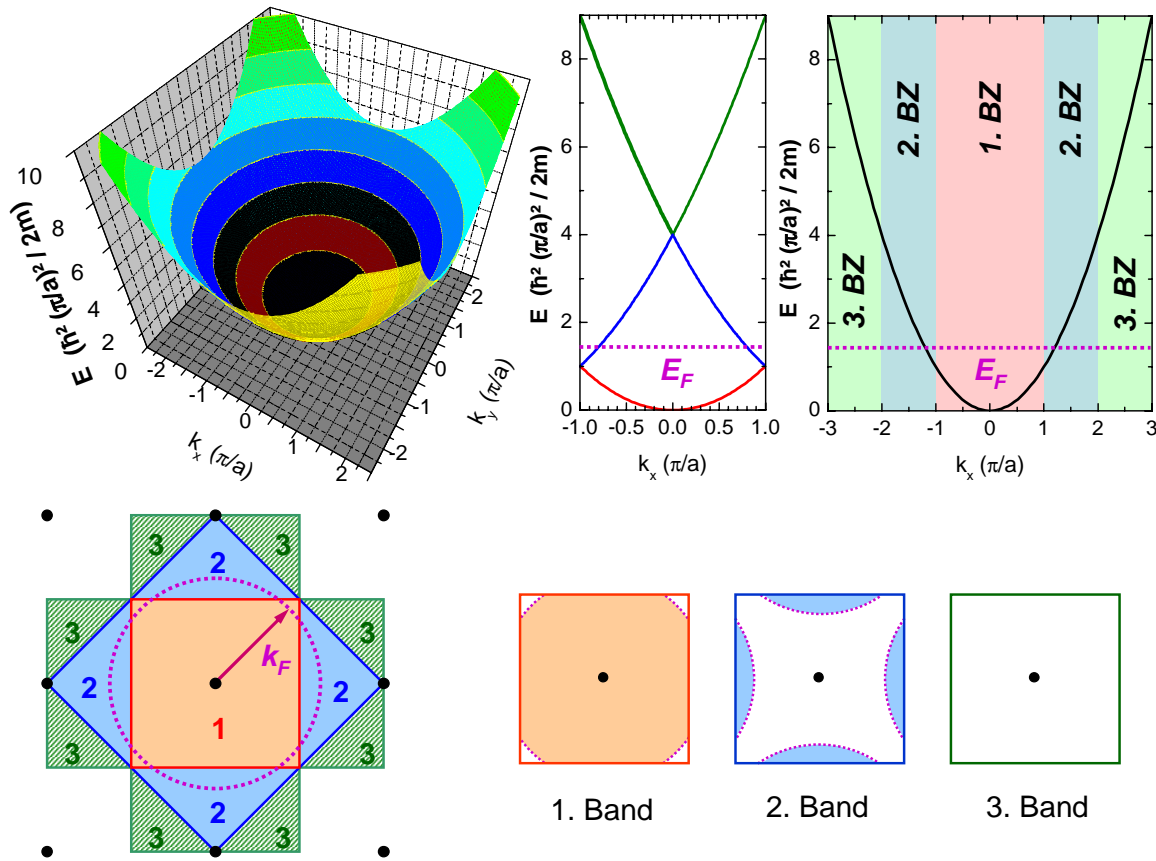
Haben wir als Basis des kubischen Gitters ein Element vorliegen, dessen Elektronenzahl ungerade ist (z.B. Natrium), so können wir zwar einige Bänder mit  $2N$  Elektronen ganz auffüllen, das oberste Band können wir aber aufgrund der ungeraden Elektronenzahl immer nur mit  $N$  Elektronen, also gerade halb füllen. Der so erhaltene Festkörper wird also ein Metall sein.

Haben wir als Basis des kubischen Gitters dagegen ein Element vorliegen, dessen Elektronenzahl gerade ist (z.B. Erdalkali-Metalle), so können wir auch das oberste Band mit 2 Elektronen, also vollständig füllen. Deshalb ist zu erwarten, dass wir für  $T \rightarrow 0$  einen Isolator vorliegen haben. Ein Isolator (oder Halbleiter) liegt aber nur dann vor, wenn es keine Bandüberschneidungen gibt. In dem betrachteten System ist dies der Fall, wenn die Bandlücke in der Mitte einer Seitenfläche der 1. Brillouin-Zone größer ist als die Energiedifferenz zwischen diesem Punkt und der Ecke. Bei Erdalkalimetallen ist dies aber nicht der Fall. Aufgrund von Bandüberschneidungen erhalten wir ein (wenn auch nicht besonders gutes) Metall und keinen Isolator.

4. Das erweiterte (jeweils links) und reduzierte Zonenschema (jeweils rechts) eines zweidimensionalen freien Elektronengases ist in der nachfolgenden Abbildung gezeigt. Es handelt sich



um ein quasikontinuierliches Energiespektrum mit parabelförmigem Verlauf. Die Fermi-Energie  $E_F = E(k_F)$  stellt die oberste Energie für die Besetzung mit Elektronen bei  $T = 0$  dar. Für  $k_F = 1.2\pi/a$  sind die Zustände der 1. Brillouin-Zone fast vollständig und diejenigen der 2. Brillouin-Zone teilweise besetzt. Die höheren Energiebänder sind vollkommen leer. Zustände der 2. und 3. Brillouin-Zone im ausgedehnten Zonenschema lassen sich durch Addition der reziproken Gittervektoren  $\mathbf{G} = (\pm 2\pi/a, 0)$  und  $\mathbf{G} = (0, \pm 2\pi/a)$  auf äquivalente Zustände in der 1. Brillouin-Zone abbilden. Die teilweise Besetzung des 1. Bandes erkennt man nicht, wenn man  $E(\mathbf{k})$  nur entlang der  $k_x$ - oder  $k_y$ -Richtung plottet, da entlang dieser Richtungen alle Zustände des 1. Bandes besetzt sind. Es sind nur einige Zustände in den Ecken der 1. Brillouin-Zone nicht besetzt.



Der Einfluss eines schwachen periodischen Potentials äußert sich im Wesentlichen darin, dass sich die Energieparabel des Elektronengases an den Grenzen der Brillouin-Zonen aufspaltet und so zwischen den einzelnen Energiebändern verbotene Zonen auftreten. Außerdem schneiden die Flächen konstanter Energie die Grenzen der Brillouin-Zonen stets senkrecht (siehe Abbildung). Dies resultiert aus der Tatsache, dass für  $\mathbf{k}$ -Vektoren auf dem Rand der Brillouin-Zonen die Bragg-Bedingung erfüllt ist und sich somit stehende Wellen ausbilden. Da die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Elektronenwellen proportional zu  $\partial E/\partial \mathbf{k}$  ist, muss auf dem Zonenrand stets  $\partial E/\partial \mathbf{k} = 0$  gelten.

