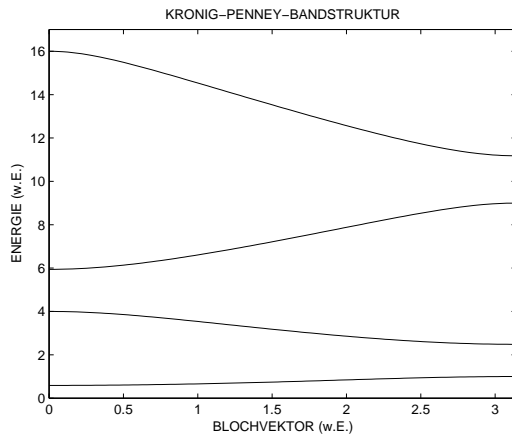
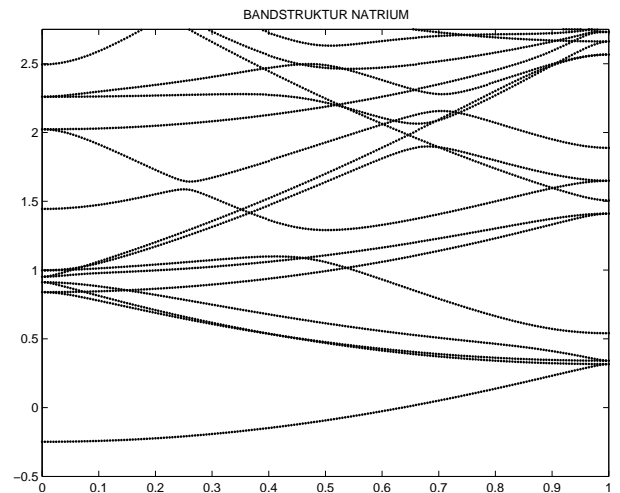


3D – BANDANALYSE



1D-Bandstruktur:
 Kronig-Penney-Atomkette
 ‘Überschaubare’ Bänder,
 kein *band crossing*,
 keine Entartungen.



3D-Bandstruktur [100]:
 Natrium-Kristall (bcc)
 ‘Band-Spaghetti’,
 viele *band crossings*,
 Entartungen von Bändern
 und Einzelpunkten.

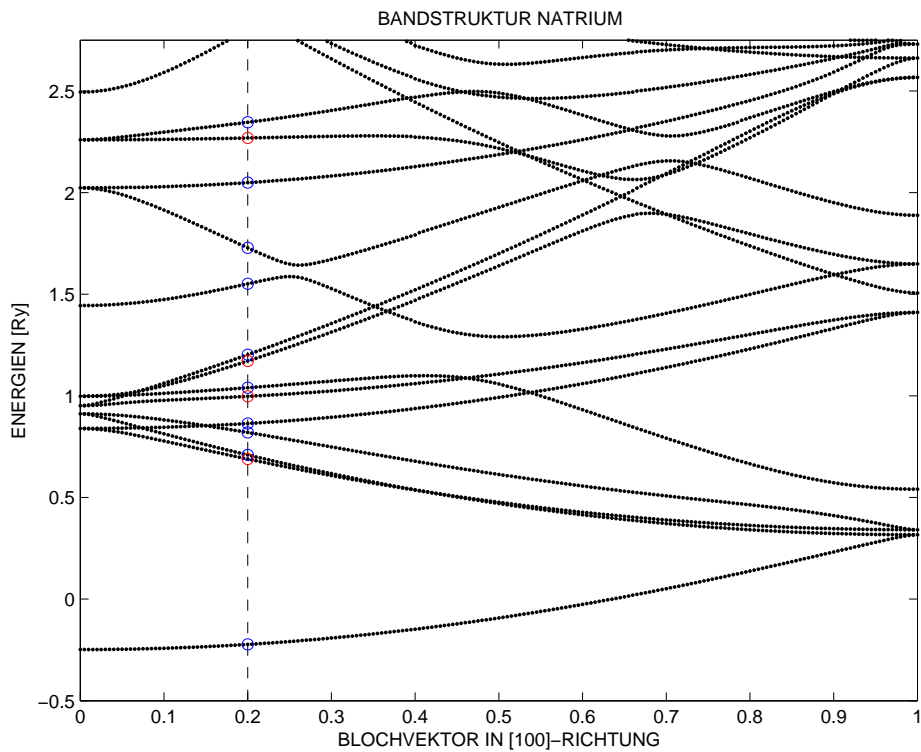
- Jeder Punkt der 3D-Bandstruktur gehört zu einem Elektronen-Blochzustand

$$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}).$$

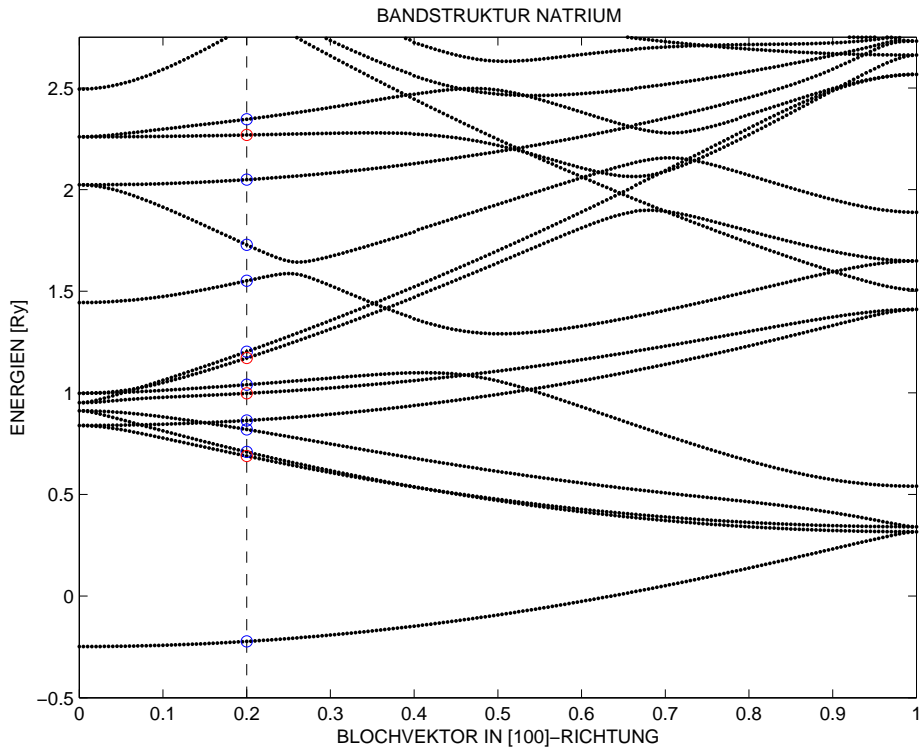
- Die gitterperiodische Modulationsfunktion $u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r})$ kann nach den Vektoren \mathbf{K} des reziproken Kristallgitters entwickelt werden:

$$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{K}} U_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}.$$

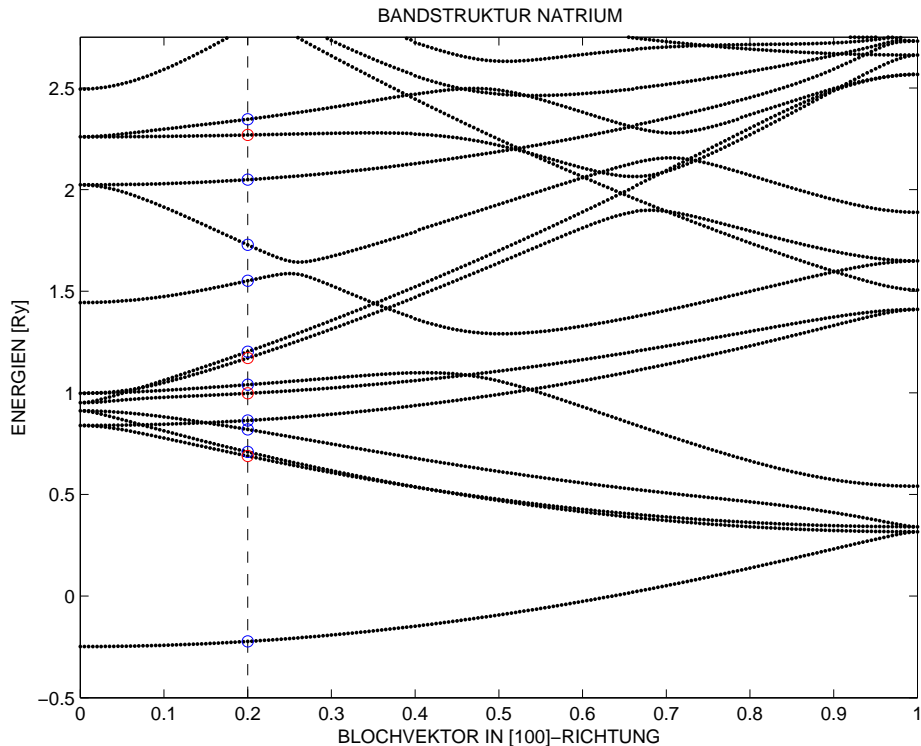
- Betrachten wir nun eine Reihe von Energiezuständen für einen fixen Blochvektor, z.B. für $\mathbf{k}_0 = 0.2$ (i. E. $2\pi/a$):



- Die Energie-Eigenwerte sind nach steigenden Energien zu nummerieren, wobei die **rot markierten** Energien 2-fach entartete Eigenwerte bedeuten.
- Es soll nun eine Klassifikation dieser Blochzustände versucht werden, indem man für alle Energien mit den Nummern 1-19 die ersten 5 Fourierkoeffizienten $U_{k,\nu}(\mathbf{K}_i)$, $i = 1, \dots, 5$ anschreibt:



(1)	-0.95794	0.05587	0.05587	0.05568	0.05587	...	
	(a)	(b)	(b)	(c)	(b)		(I)
(2)	0	0.67371	0.11470	-0.06072	-0.11470	...	
(3)	0	0.11470	-0.67371	0.04305	0.67371	...	
	(0)	(a)	(b)	(c)	(-b)		(II)
(4)	0	-0.49804	0.49804	0	0.49804	...	
	(0)	(a)	(-a)	(0)	(a)		(III)
(5)	-0.00847	-0.40984	-0.40984	0.23661	-0.40984	...	
	(a)	(b)	(b)	(c)	(b)		(I)
(6)	0	0	0	-0.49778	0	...	
	(0)	(0)	(0)	(a)	(0)		(IV)
.							
.							

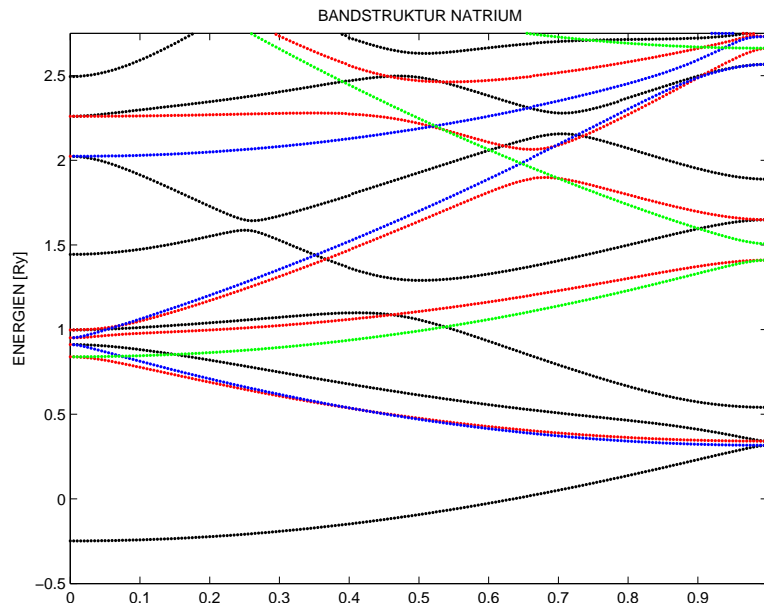


- Man kann nun zeigen, daß **alle Energiezustände** im obigen Bandstruktur-Diagramm einem dieser 4 Muster (I, II, III, IV) von Fourierkoeffizienten zugeordnet werden können.

Um genau zu sein: es gibt noch ein ‘Muster’ (V), das aber erst bei höheren Energien über 3 Rydberg vorkommt.

- Diese 5 Typen beschreiben die 5 verschiedenen Symmetrie-Eigenschaften der Blochfunktionen für k entlang der $[100]$ -Richtung.
- In den folgenden Diagrammen wird nun der Typus, zu dem ein Blochzustand gehört, durch eine entsprechende Farbe gekennzeichnet:

TYP	I	SCHWARZ	
TYP	II	ROT	(2-fach entartet)
TYP	III	BLAU	
TYP	IV	GRUEN	



Bandstruktur von bcc Natrium entlang der $[100]$ -Richtung. Die Bänder sind gemäß ihrer Symmetrie 'eingefärbt'.

- Im Folgenden sind die 'Sub-Bandstrukturen' der verschiedenen Symmetrie-Typen in eigenen Diagrammen dargestellt. Wie Sie sehen, gibt es bei keiner der 'Sub-Bandstrukturen' ein *band crossing*, und sie sind (fast) ebenso überschaubar wie 1D-Bandstrukturen:

