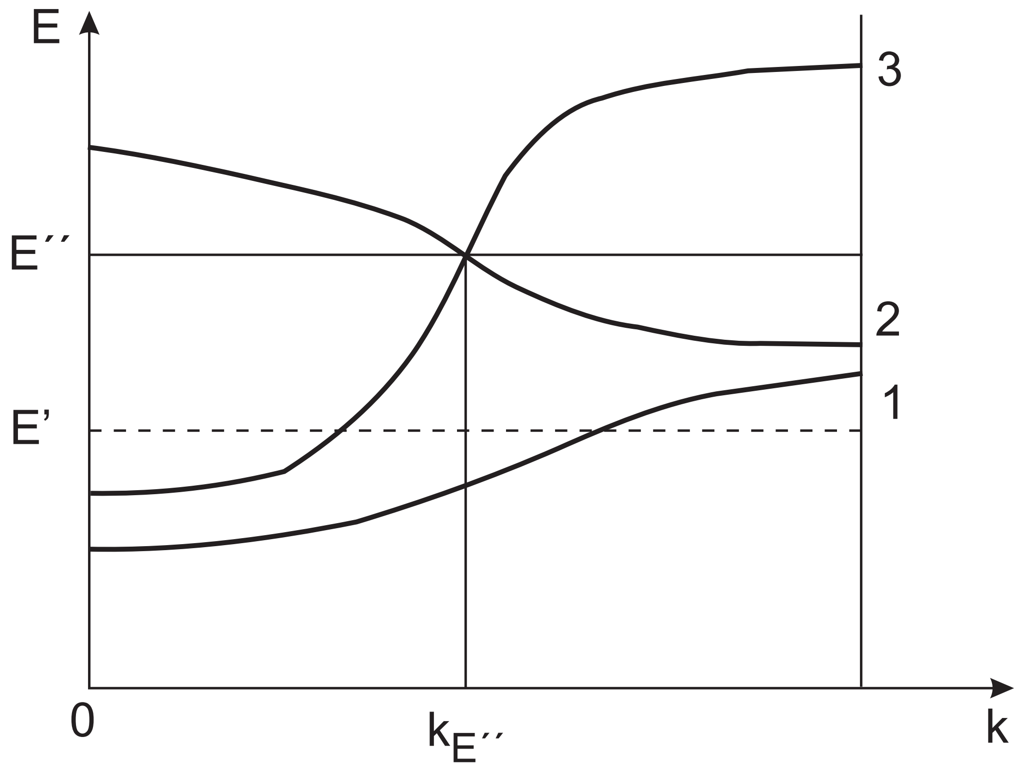

Abbildung 1: Beispiel für Energiebänder.

Wie sieht eine realistischere Elektronenbandstruktur aus?

Das Folgende gemäss *Bandanalyse_Natrium.pdf*

Orthogonalität von Blochfunktionen (Skriptum S. 26f)

$$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{k} \in \mathbf{1.\ BZ}. \tag{1}$$

Es gilt die *Orthonormierungsbedingung*

$$\langle \psi_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\nu,\nu'} \,. \tag{2}$$

Setzt man die Blochfunktionen in diese Bedingung ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega &= \frac{1}{\Omega} \int\limits_{(\Omega)} d^3r\, u^*_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r\, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \\
&= \frac{G}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r\, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}}.
\end{aligned}$$

Wegen $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathbf{1.\ BZ}$ gilt

$$\delta_{\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \delta_{\mathbf{K},0} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \,,$$

und es folgt unmittelbar

$$\langle \psi_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{1}{\Omega_0} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r\, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}).$$

Für gleiche Blochvektoren $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ gilt demnach

$$\langle \psi_{\mathbf{k},\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega = \frac{1}{\Omega_0} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r\, u^\star_{\mathbf{k}\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) \,, \tag{3}$$

woraus man durch Vergleich von Glg. (10) mit Glg. (11) sofort die für die praktische Rechenarbeit wichtige Beziehung

$$\frac{1}{\Omega_0} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r\, u^*_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k},\nu'}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu,\nu'} \tag{4}$$

erhält.

Orthogonalität von Blochfunktionen (Skriptum S. 26f)

$$\psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{k} \in \mathbf{1.\ BZ}. \tag{5}$$

Es gilt die *Orthonormierungsbedingung*

$$\langle \psi_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\nu,\nu'} \,. \tag{6}$$

Setzt man die Blochfunktionen in diese Bedingung ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega &= \frac{1}{\Omega} \int_{(\Omega)} d^3r \, u^*_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}} \int_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \\
&= \frac{G}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \int_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}}.
\end{aligned}$$

Wegen $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathbf{1.\ BZ}$ gilt

$$\delta_{\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \delta_{\mathbf{K},0} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \,,$$

und es folgt unmittelbar

$$\langle \psi_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{1}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}).$$

Für gleiche Blochvektoren $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ gilt demnach

$$\langle \psi_{\mathbf{k},\nu'}(\mathbf{r}) \,|\, \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle_\Omega = \frac{1}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) \,, \tag{7}$$

woraus man durch Vergleich von Glg. (10) mit Glg. (11) sofort die für die praktische Rechenarbeit wichtige Beziehung

$$\frac{1}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} d^3r \, u^*_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k},\nu'}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu,\nu'} \tag{8}$$

erhält.

Orthogonalität von Blochfunktionen (Skriptum S. 26f)

$$\langle \mathbf{r} \,|\, \mathbf{k}, \nu \rangle = \psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{k} \in \mathbf{1.\ BZ}. \tag{9}$$

Es gilt die *Orthonormierungsbedingung*

$$\langle \mathbf{k}', \nu' \,|\, \mathbf{k}, \nu \rangle_\Omega = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\nu,\nu'} \,. \tag{10}$$

Setzt man die Blochfunktionen in diese Bedingung ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}', \nu' \,|\, \mathbf{k}, \nu \rangle_\Omega &= \frac{1}{\Omega} \int\limits_{(\Omega)} d^3r \, u^*_{\mathbf{k}',\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \\
&= \frac{G}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}}.
\end{aligned}$$

Wegen $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in$ 1. BZ gilt

$$\delta_{\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \delta_{\mathbf{K},0} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \,,$$

und es folgt unmittelbar

$$\langle \mathbf{k}', \nu' \,|\, \mathbf{k}, \nu \rangle_\Omega = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{1}{\Omega_0} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}'\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}).$$

Für gleiche Blochvektoren $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ gilt demnach

$$\langle \mathbf{k}, \nu' \,|\, \mathbf{k}, \nu \rangle_\Omega = \frac{1}{\Omega_0} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r \, u^\star_{\mathbf{k}\nu'}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) \,, \tag{11}$$

woraus man durch Vergleich von Glg. (10) mit Glg. (11) sofort die für die praktische Rechenarbeit wichtige Beziehung

$$\frac{1}{\Omega_0} \int\limits_{(\Omega_0)} d^3r \, u^*_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k},\nu'}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu,\nu'} \tag{12}$$

erhält.