

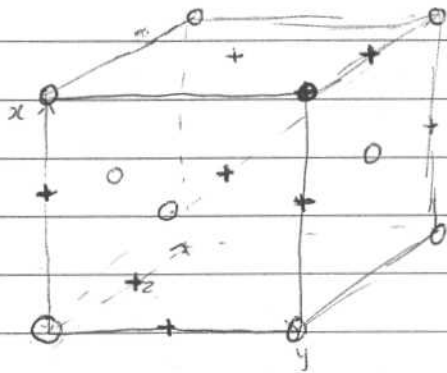
Tentamen 17-02-2010

Opgave 1:

a) NaCl structuur: fcc met 2 ion basis, z^+ ion verschoven over $\frac{1}{2}$ diagonaal.

Verder heeft elk ion een simpel kubische inbedding van ander ion:

Dms: fcc (000) $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$. zeg Na ofwel Pb^+
 en $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $(1 1 \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2} 1 1)$ $(1 \frac{1}{2} 1)$ voor Cl^-
 ofwel $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $(0 0 \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2} 0 0)$ $(0 \frac{1}{2} 0)$



6 naaste buren van ander ion

ZnS: diamant is fcc met 2-atoom basis verschoven over $\frac{1}{4}$ diagonaal
 (000) en $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ → tetraeder omringing
 ofwel 4 naaste buren van ander ion

Dms: (000) $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$
 en $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4})$ $(\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4})$ $(\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4})$

b)
$$U_{ij} = k e^{-r_{ij}/\rho} \pm \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

De eerste term geeft de exponentiële afstotende interactie tussen twee ionen, als ze heel dicht bij elkaar komen en de elektron ladingverdeling significant gaat veranderen. ρ is de range (bereik) van de interactie, en $\rho \ll R_0$ (de evenwichtsafstand van naaste buren).

De tweede term is de lange afstand Coulomb interactie, die aantrekkend of afstotend is al naar gelang de ionen

gelijke of tegengestelde lading hebben. In een \pm ionisch kristal zal een bepaald ion altijd omringd zijn door andere ionen met tegengestelde lading (in NaCl (6NN), CsCl (8NN) of ZnS (4NN) structuur).

In een kristal zal de totale potentiële energie (in absolute waarde) gemaximaliseerd zijn bij een bepaalde naaste buur afstand R_0 , de evenwichtsruiterafstand.

c) De totale energie wordt (voor zN ionen) gegeven door

$$U_{\text{tot}} = zN \frac{1}{2} U_i = zN \cdot \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \left(\lambda e^{-\frac{r_{ij}}{\rho}} + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right)$$

Voor de eerste term nemen we alleen de naaste buien mee, ^(zqz) de tweede term moet over de hele kristalstructuur gesommeerd worden, en die kristal som $\sum_{j \neq i} \frac{(\pm)^j}{r_{ij}} \equiv \alpha$ is de Madelung constante,

met $r_{ij} = \frac{r_{ij}}{R}$

zodat
$$U_{\text{tot}} = N \left(z\lambda e^{-\frac{R}{\rho}} - \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right)$$

De evenwichtsnaaste buur afstand R_0 wordt gevonden, doordat

$$\frac{dU_{\text{tot}}}{dR} \Big|_{R=R_0} = 0 \quad \text{ofwel} \quad -\frac{z\lambda}{\rho} e^{-\frac{R_0}{\rho}} + \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 R_0^2} = 0$$

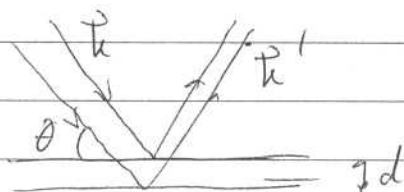
$$\text{ofwel} \quad R_0^2 e^{-\frac{R_0}{\rho}} = \frac{\rho \alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 z\lambda}$$

Bereken rechtstreeks, en vul een paar waarden van R_0 in de buurt van de gegeven exp R_0 in, om een schatting te krijgen. Merk op dat in de twee structuren α en z verschillend zijn.

d) Met de verkregen P_0 kan de cohesie energie berekend worden, per ion of per "molecuul".

e) Met X-ray diffractie kan een kristalstructuur bepaald worden.

9 Er treedt constructieve interferentie op bij reflectie aan ~~een~~ kristalvlakken, wanneer $2d \sin \theta = n\lambda$, n geheel waarbij λ de golflengte van de inkomende X-ray is, en d de afstand tussen de reflecterende parallelle vlakken. θ is de hoek tussen de inkomende bundel, en het vlak.



Er treedt alleen constructieve interferentie op wanneer ~~de~~ het verschil tussen k en k' precies een reciproche rooster vector is.

Met op dat $|k| = |k'|$: elastische verstrooiing.

Wanneer nu X-ray diffractie wordt verricht aan een structuur met een meer-atomige basis, of wanneer de diffractie wordt bekeken met behulp van een niet-primitieve cel, is de structuurfactor van belang, gegeven door

$$S_G = \sum_j f_j e^{iG \cdot \vec{r}_j}, \text{ waarbij}$$

G een reciproche roostervector is, en \sum_j een som is over alle basisatomen in de bekeken eenheidscel, op posities \vec{r}_j .

Stel $G = 2\pi (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)$, h, k, l geheel (+, -) met \vec{b}_i de reciproke eenheidsvectoren in de hier bekeken sim kub structuur: $\frac{\hat{x}}{a}, \frac{\hat{y}}{a}$ en $\frac{\hat{z}}{a}$.

Omdat de NaCl en de ZnS structuur verschillende r_j hebben (verschillende posities van basis factoren), ~~zullen~~ zullen verschillende lijnen hoge of lage intensiteit hebben. De atomaire vormfac

van Pb zal groter zijn dan van Cl (meer elektronen), maar $f_{Pb} + f_{Cl}$ en $f_{Pb} - f_{Cl}$ zal merkbaar verschillend zijn.

(P.S: Als iemand echt de structuurfactor berekend heeft, is dat heel netjes)

Vervolg berekeningen:

$$R_0^2 e^{-R_0/s} = \frac{f \times q^2}{4\pi \epsilon_0 z \lambda} = \frac{\alpha \cdot f q^2}{z \cdot 4\pi \epsilon_0 \lambda}$$

NaCl: $\alpha = 1.747565$, $z = 6 \Rightarrow$ Rechterlid = $4.0743 \times 10^{-24} \text{ m}^2$

ZnS: $\alpha = 1.6381$; $z = 4 \Rightarrow$ Rechterlid = $5.73 \times 10^{-24} \text{ m}^2$

Maak een klein tabelletje van $R_0^2 e^{-R_0/s}$ met een paar waarden voor R_0 in de buurt van de gegeven experimentele $R_0 = 0.3291 \text{ nm}$.

$R_0 \text{ (nm)}$	$R_0^2 \exp(-R_0/s)$ in m^2
0.30	8.32×10^{-24}
0.31	6.52×10^{-24}
0.32	5.10×10^{-24}
0.33	3.981×10^{-24}

In onze berekening voor NaCl-structuur vinden we dus $R_0^a \approx 0.33 \text{ nm}$ en voor de ZnS-structuur $R_0^b \approx 0.315 \text{ nm}$.

Nu kunnen we de cohesie energie berekenen via

$$\frac{U_0}{N} = z \lambda e^{-R_0/s} - \frac{\alpha q^2}{4\pi \epsilon_0 R_0} \quad \text{in} \quad \frac{f \alpha q^2}{4\pi \epsilon_0 R_0^2} - \frac{\alpha q^2}{4\pi \epsilon_0 R_0} = -\frac{\alpha q^2}{4\pi \epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{f}{R_0}\right)$$

ZnS: $\alpha = 1.6381$; $R_0^b = 0.315 \text{ nm} \Rightarrow \frac{U_0}{N} = -1.075 \times 10^{-18} \text{ J/PbCl}$

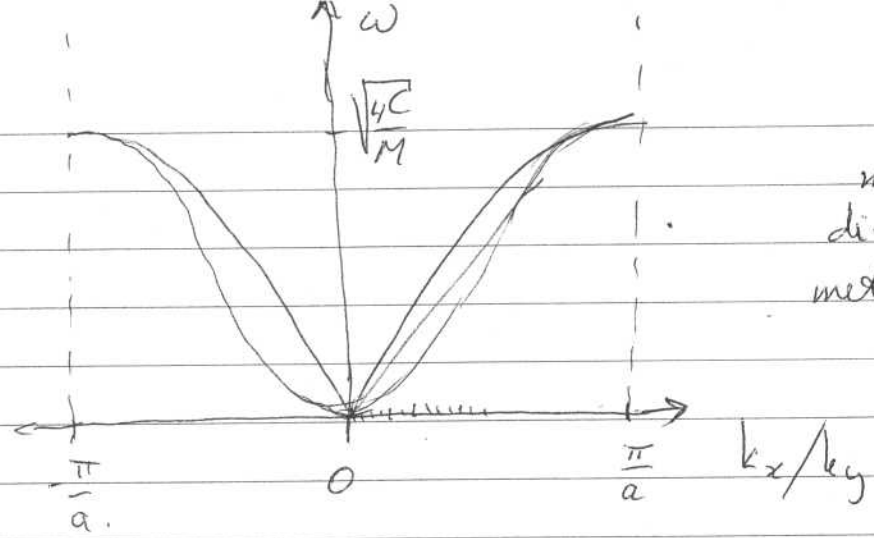
NaCl: $\alpha = 1.747565$; $R_0^a = 0.33 \text{ nm} \Rightarrow \frac{U_0}{N} = -1.10 \times 10^{-18} \text{ J/PbCl}$

\Rightarrow Verschil is erg klein ($\approx 2\%$). Dit kan ~~ook~~ ook tgv benaderingen (geen kinetische term, alleen NN in exp. term) zijn. Dus zelfs al ligt exp. waarde in de buurt dan is het nog niet zeker welke structuur het moet zijn. Ik moet zeker weten dat berekening binnen 2% nauwkeurig is (overigens $U_0, \text{exp} = -1.11 \times 10^{-18} \text{ J/PbCl}$)

Opgave 2

a) Bij zeer lage temperatuur zal elk atoom een zeer geringe trillingbeweging uitvoeren in het minimum van de potentiaal gegeven door (vooral) de naaste buur atomen. In evenwicht is uiteraard de eerste afgeleide van de potentiaal naar de afwijking uit evenwicht (zeg $u = x - x_0$) nul, en bij kleine u zal ook de derde orde term veel kleiner zijn dan de tweede orde term. Dus kan de beweging als harmonisch beschreven worden. Quantummechanisch blijft er ook altijd de grondtoestandskinetische energie (zeg $\frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{k}{m}}$). Bij hogere temperatuur zal de gemiddelde uitwijking toenemen, de beweging niet harmonisch meer zijn, en de derde orde term in de potentiaalontwikkeling zal voor thermische uitrekking zorgen. Bij voldoende hoge temperatuur treedt "klassiek" gedrag op, d.w.z. een kinetische energie $\frac{1}{2} kT$ per vrijheidsgraad, en dus een constante soortelijke warmte. Het is de verdienste van Einstein (quantum gedrag, ofwel minimumtrillingenergie) en van Debye (coherente trillingen, gekoppeld) dat ~~de~~ verbleed kon worden dat de soortelijke warmte bij lage temperatuur afneemt (uiteindelijk bleek Debye correct). Bij zeer hoge temperatuur wordt thermische beweging zo sterk, dat de periodieke ordening verdwijnt, en het kristal smelt.

b) Zeg het kristal heeft afmeting $L \times L$. Dan zeggen de Per. Rand Voor dat voortelle resonanttrilling ~~met~~ beschreven met golfgetal k , moet gelden dat
$$e^{ikx} = e^{ik(x+L)} \quad e^{iky} = e^{ik(y+L)}$$
 Dus geldt $k_{x,y} = n \cdot \frac{2\pi}{L}$ met $\frac{N'}{2} < n < \frac{N'}{2}$, met N' het aantal atomen langs de x -as of y -as ($N' = \sqrt{N}$)



Een eigentrilling (normal mode) is een trillingswijze die beschreven kan worden met één enkele frequentie ω . Elke werkelijke beweging van het atoomsysteem zal een lineaire combinatie van normal modes zijn.

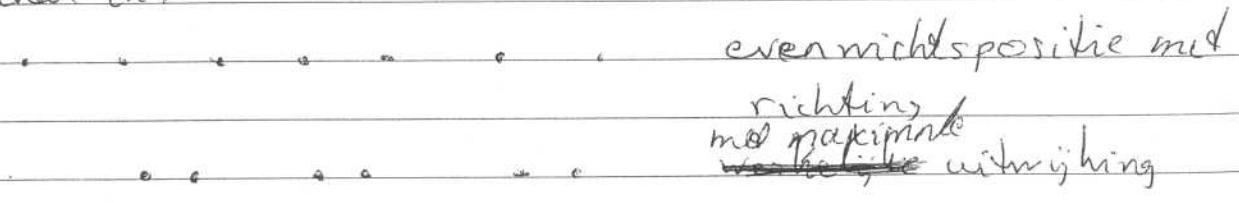
c) Groepsnelheid $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$; Fasesnelheid $v_f = \frac{\omega}{k}$

Voor $k \ll 1$ zijn groepsnelheid en fase snelheid aan elkaar gelijk, en die snelheid is de geluidssnelheid, gegeven door

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\sqrt{\frac{4C}{M}} \sin \frac{1}{2}ka}{k} = \frac{\sqrt{\frac{4C}{M}} \frac{ka}{2}}{k} = a \sqrt{\frac{C}{M}}$$

Voor $k \rightarrow \frac{\pi}{a}$ gaat de groepsnelheid naar nul, er ontstaat ahw een staande golf; de fase verandert met een factor $\frac{e^{ik(x+a)}}{e^{ikx}} = e^{ika} \xrightarrow{k \rightarrow \frac{\pi}{a}} e^{i\pi} = -1$

Atomen naburige atomen, ofwel ze bewegen paarsgewijs tegen elkaar in.



(Sommige 'lineaire kristallen' zijn zelfs instabiel tegen zón ~~trilling~~ trilling, en vertonen een faseovergang naar een 'moleculaire' vorm - Peierls instability).

2d] In het Debye model wordt de benadering gebruikt dat de dispersie-relatie lineair is ($\omega = v_s k$) tot aan de cutoff frequentie ω_D zodanig dat het totaal aantal modes gegeven blijft door de vrijheidsgraden (hier $2N$: N atomen, twee polarisaties).

Het aantal modes per polarisatie N' met golfvector $k \leq k'$ is dus

$$N' = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot \pi k'^2 = \frac{L^2}{4\pi} \frac{\omega'^2}{v_s^2}$$

waarmee de toestandsdichtheid (laat 'weg):

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{L^2}{2\pi v_s^2} \omega$$

De Debye frequentie wordt gedefinieerd door

$$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = \frac{L^2}{4\pi} \frac{\omega_D^2}{v_s^2}$$

Debye - Temperatuur: $\hbar \omega_D = k_B T_D$

$$\Rightarrow T_D = \frac{\hbar}{k_B} \omega_D$$

e]

$$\langle E \rangle = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega D(\omega)}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega \stackrel{x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}, \hbar \omega_D \ll \hbar \omega}{\approx} \int_0^{\infty} \frac{\hbar \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 x^2}{e^x - 1} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right) dx$$

$$\propto T^3$$

$$\Rightarrow C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \propto T^2$$

f]

$$k_B T \gg \hbar \omega_D: C_V = \frac{1}{2} k_B \cdot 2N = N k_B$$

heat capacity of 1 atom $\left\{ \begin{array}{l} \text{degrees of freedom} \\ \text{N atoms} \\ \text{2 dimensions} \end{array} \right.$

$$\langle E \rangle = N k_B T = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle$$

$= C \sim \text{"veerconst"}$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{2 k_B T}{m \omega^2} \text{ of } \langle x^2 \rangle = \frac{2 k_B T}{C}$$

internal energy

~~_____~~

Opgave 3

o) De kracht op een lading is de Lorentzkracht

$$\vec{F} = (q\vec{E} + q(\vec{v} \times \vec{B})) \quad \text{waarbij de lading van de ladingdrager is (rij electron } q = -e)$$

De bewegingsvergelijking

$$\vec{F} = m\vec{a} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$$

Fermibol raakt verplaatst en uiteindelijk geldt: $\hbar \delta k = F \delta t$

instationair evenwicht \rightarrow ofwel $\delta k = \frac{Fz}{\hbar}$

met $\vec{F} = -e\vec{E}$ (afgeleid met $\vec{B} = 0$)

De gemiddelde snelheidsverandering, of driftsnelheid van het totale Fermi / ladingdrager systeem is dus

$$\vec{v}_D = \frac{\hbar \delta k}{m} = \frac{-eEz}{m}$$

Dit levert dan als bewegingsvergelijking

$$\hbar \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \delta k = \vec{F} = m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \vec{v} = \vec{F}$$

In componenten geschreven wordt dat $(\vec{F} = -e\vec{E} - e\vec{v} \times \vec{B})$

$$\text{en } m\vec{v} = \hbar \delta \vec{k}$$

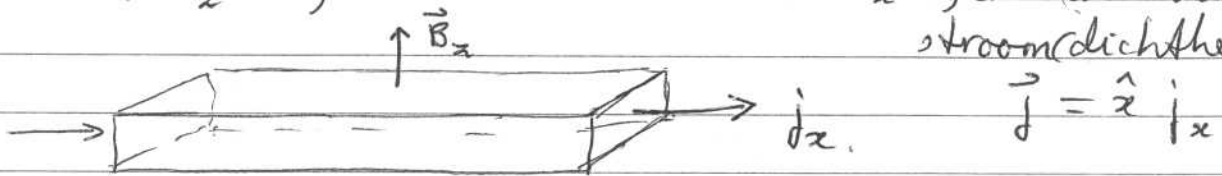
$$\text{en } \vec{B} = \hat{z} B_z$$

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_x = -eE_x - e v_y B_z \quad (1)$$

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y = -eE_y + e v_x B_z \quad (2)$$

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_z = -eE_z \quad (3)$$

b) Het Hall effect ontstaat wanneer een materiaal (vaak in staaf of film vorm) geplaatst wordt in een elektrisch en magnetisch veld loodrecht op elkaar. Het elektrische veld wordt aangebracht via contacten en veroorzaakt een stroom. Het magnetisch veld staat dus loodrecht op die stroom. Kies weer $\vec{B} = \hat{z} B_z$, en kies $\vec{E} = \hat{x} E_x$, en dus ook de stroom(dichtheid)



De stroom in de x -richting betekent uiteraard een driftsnelheid in de x -richting. In de y - en z -richting zijn er geen contacten, dus in evenwicht een driftsnelheid nul.

Vergl ① levert gewoon de wet van Ohm:

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_x = -e E_x \quad \begin{array}{l} \text{in} \\ \text{evenwicht} \\ \frac{d}{dt} v_x = 0 \end{array} \quad m \frac{v_x}{\tau}$$

$$\text{ofwel } j_x = n q v_x = \frac{n(-e)(-e)\tau}{m} E_x$$

$$= \frac{n e^2 \tau}{m} E_x$$

$$= \sigma E_x \quad \text{④}$$

met σ de elektrische geleidbaarheid
($\sigma = \frac{1}{\rho}$, met ρ de soortelijke weerstand)

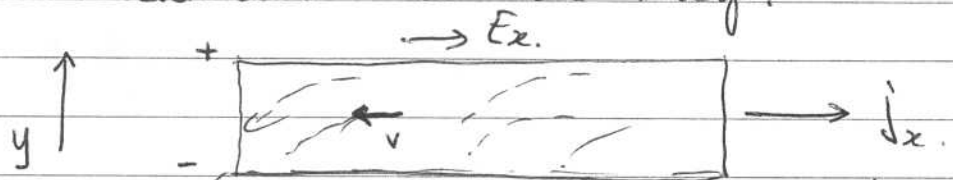
Vergl ② levert het Hall effect:

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y = 0 = -e E_y + e v_x B_z$$

Omdat $v_x \neq 0$ en $B_z \neq 0$, moet er een $E_y \neq 0$ ontstaan:

Er komt een elektrisch veld vanwege afbuigen van de ladingdragers, die in x -richting bewegen in een loodrecht magnetisch veld B_z .

Bovenaanzicht van de staaf:



(extra electronen aan onderkant, dus elektrisch veld E_y naar beneden gericht (altijd van + \rightarrow -))

$$E_y = + v_x B_z = + \frac{j_x}{n(-e)} B_z = - \frac{j_x B_z}{ne}$$

De Hall coeff is gedefinieerd als $R_H = \frac{E_y}{j_x B_z}$, zodat

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

Dit is dus de oorsprong wanneer er alleen negatieve ladingdragers zijn, met dichtheid n en lading $-e$.

c) In een halfgeleider zijn ^{effectief} zowel positieve als negatieve ladingdragers, die onder invloed van een elektrisch veld (zeg $\vec{E} = \hat{x} E_x$) in tegengestelde richting bewegen, en dus ook in tegengestelde richting afbuigen in een magnetisch veld. Afhangend van de dichtheden van die twee typen ladingdragers en hun 'beweeglijkheid' (ofwel respons op electr. veld ofwel effectieve massa), kan men zich voorstellen dat in een halfgeleider de Hall coeff zowel positief als negatief kan zijn. We kunnen dat kwantitatief

maken vanuit de bewegingsvergelijkingen. De geleidbaarheid zal nu een combinatie zijn van de stroom van de positieve en de negatieve ladingdragers. Om die te kunnen onderscheiden definiëren we de mobiliteit (beweeglijkheid) — zie Kittel pag 208) als

$$\mu = \frac{|v|}{E}, \text{ ofwel } \mu_h = \frac{|v_h|}{E_x} \text{ en } \mu_e = \frac{|v_e|}{E_x}$$

$$\text{en } v = \frac{q\tau}{m} E_x, \text{ zodat } \mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e} \text{ en } \mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h} \quad (5)$$

$\mu > 0$ altijd (gedefinieerd).

Dus nu ~~heeft~~ (2) twee bijdragen, voor gaten en voor elektronen (in evenwicht $\frac{d}{dt}$ term is nul)

$$\text{electronen: } m_e \frac{v_{y,e}}{\tau} = -e E_y + e v_{x,e} B_z$$

$$\text{gaten: } m_h \frac{v_{y,h}}{\tau} = +e E_y - e v_{x,h} B_z$$

Herschrijven met behulp van (4) en (5) levert

$$j_{y,e} = \frac{ne^2\tau}{m_e} E_y + \frac{ne^2\tau\mu_e}{m_e} E_x B_z = \sigma_e E_y + \sigma_e \mu_e E_x B_z$$

$$(\text{met } \sigma = \sigma_e + \sigma_p = \frac{ne^2\tau}{m_e} + \frac{pe^2\tau}{m_h} = n\mu_e + p\mu_h)$$

$$\text{en } j_{y,h} = \frac{pe^2\tau}{m_h} E_y - \frac{pe^2\tau\mu_h}{m_h} E_x B_z = \sigma_p E_y - \sigma_p \mu_h E_x B_z$$

$$\text{Uiteraard weer } j_y = j_{y,p} + j_{y,e} = 0 \quad \text{en } \mu_{eh} = \frac{e\tau}{m_{e,h}}$$

$$0 = (p\mu_h + n\mu_e) E_y + (n\mu_e^2 - p\mu_h^2) E_x B_z$$

$$\text{Gebruik } j_x = \sigma E_x = (p\mu_h + n\mu_e) E_x$$

$$\text{zodat } R_H = \frac{E_y}{j_x B_z} = \frac{(n\mu_e^2 - p\mu_h^2) E_x B_z}{(p\mu_h + n\mu_e) B_z} \cdot \frac{1}{(p\mu_h + n\mu_e) E_x} = \frac{1}{e} \frac{p\mu_h^2 - n\mu_e^2}{(p\mu_h + n\mu_e)^2}$$

Opgave 4.

De Schr. Verg. $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

beschrijft vrije deeltjes (electronen) wanneer $U(\vec{r})=0$. De opl.ⁿ zijn dan vlakke golven:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \text{ met label } \vec{k}$$

In het bijna-vrije electron model wordt gebruik gemaakt van het opmerkelijke feit, dat de buitenste electronen van een atoom in het kristal slechts een zwakke (periodieke) potentiaal onder- vinden. De sterke wisselwerking met kernen en overige electronen wordt sterk afgeschermd.

Omdat de potentiaal ~~is~~ periodiek is ($U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{T})$) zal de opl. van de golf functie van elk electron moeten vol- doen aan de Blochvoorwaarde:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \text{ met } u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T})$$

(dit geldt altijd, ook voor Tight Binding).

~~Omdat~~ In de benadering dat $U(\vec{r})$ zwak is, zal de electron- golfie niet echt veel veranderen tov de situatie dat $U(\vec{r})=0$, en kan de golfie v h electron in het kristal gescreven kunnen worden als een lineaire combinatie van slechts een paar vlakke golven.

$$\text{of } \psi = \sum_{\vec{k}} C(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{k} + \vec{G})\cdot\vec{r}}$$

(Kittel verg (25)) (Kittel verg (29), H7)

Als $U(\vec{r})$ een zwakke periodieke (en meestal vrij gladde) potentiaal is, zal ook $U(\vec{r})$ ontwikkeld kunnen worden in slechts een paar Fourier componenten

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

Inullen van $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ en $U(\vec{r})$ in de Schr. Vgl. levert nu een ^{set} algebraïsche vergelijkingen op in de coëfficiënten $C(\vec{k}-\vec{G})$, die slechts een opl. heeft wanneer de determinant nul is.

Dit nul stellen levert voorwaarden op voor de energie (eigen)waarden $E_{\vec{k}}$, de oplossingen, die we de dispersie relaties ~~noemen~~ noemen.

Omdat het een Björn vrij electron model is, zal de matrix vrij laag dimensionaal zijn \rightarrow 2-5 coëfficiënten meenemen levert al een zeer goed resultaat.

Als uitkomst wordt gevonden dat ~~dit~~ vooral in de nabijheid van $\vec{k} \approx \vec{G}$ (interferentieconditie) verandering van $E_{\vec{k}}$ (tov $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$) optreedt, en banden ontstaan.

Deze benadering zal redelijk goed zijn voor de buitenste electronen, die ~~zorg~~ waarvan de atomaire golf ^{ie} sterk gaan overlappen, zodat de electronen door het hele kristal ^(in het kristal) kunnen bewegen \rightarrow goed geleidende metalen (~~periode~~ ^{Kolom} 1 en 2 van Periodisch Systeem, plus overgangsmetalen waar d-schil gevuld wordt, maar "daar buiten" de s en p schillen zijn).

Tight Binding Benadering

Wanneer atomen bij elkaar gebracht worden om een kristal te vormen, dan zullen de electronen in de binnenschillen daar wel wdt van merken (niet meer alleen de Coulombpotentiaal van de eigen kern) maar niet zoveel. De golf ^{ie} van die electronen zal dus niet zoveel veranderen, en we kunnen de oorspronkelijke atomaire golf ^{ie} als goed uitgangspunt gebruiken, ofwel een lineaire combinatie kunnen vormen van slechts weinig atomaire orbitals, om de nieuwe golf ^{ie} te beschrijven. Dit zal ook een redelijke benadering zijn voor situatie waar electronen nog vooral een

grote waarschijnlijkheid hebben bij 1 atoom (ion) te behoren (bv d-electronen in overgang metalen)

We gaan dus uit van de ongestoorde atomaire Hamiltoniaan

$$H_{at} \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r}), \quad (*)$$

waarbij H_{at} min of meer de waterstof atoom Hamiltoniaan is, maar aangepast aan de situatie van meerdere electron.

De nieuwe oplossing in het kristal zal dan iets zijn als

$$\psi_{k,n}(\vec{r}) = \sum_j C_{kj} \psi_n(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

waarbij \vec{r}_j de positie van ion j in het kristal is, en dus gesommeerd wordt over een aantal atomaire el. golffuncties op andere roosterposities, met coëff C_{kj} .

Uiteraard komt golfgetal (of label) k er weer in voor vanwege de vereiste Bloch vorm.

Uiteraard kunnen we alle $\psi_n(\vec{r} - \vec{r}_j)$ meenemen, en dan een willekeurige vorm van $\psi_{k,n}(\vec{r})$ krijgen (ook sommatie

over schil of band n is dan nodig), maar in de echte hechte binding benadering gaan we ervan uit dat alleen de golffuncties met de naaste buien enigzins overlappen en de electron energie is dan min of meer van de vorm

$$E_k = A - B \sum_{NN} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{NN}}$$

waarbij A min of meer de atomaire energie is (oplossing van de atomaire Schr. Verg), en B de overlap energie, die de variatie van E met k weergeeft (dispensie relatie).