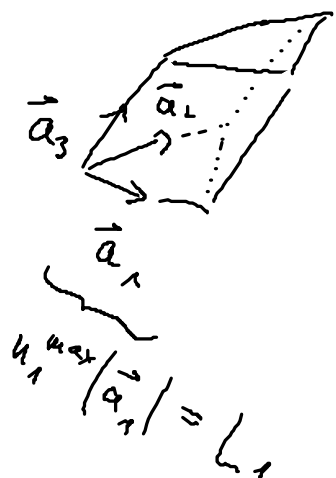


Blockfunktionen $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_k(\vec{r})$

b) Bestimmung der erlaubten k -Werte

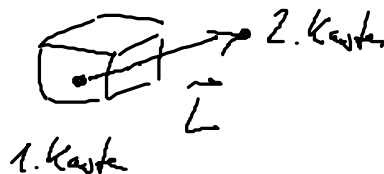
betrachten Kristall der in die Richtungen der $\{\vec{a}_i\}$ ausgebreitet ist, mögl.weise schiefwinklig \longrightarrow



$$L_i = |\vec{a}_i| u_i^{\max}$$

um die k -Werte zu bestimmen: periodische RB und stell uns viele Kristalle aneinander gereiht vor, um \vec{L} verschoben, $\vec{L} = (L_1, L_2, L_3)$

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{L}) = \psi_k(\vec{r})$$



dh. dieselbe Physik in diesen Kästen.

$$e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r} + \vec{L})} u_k(\vec{r} + \vec{L}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_k(\vec{r})$$

$u_k(\vec{r})$
(gitterperiodisch)

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{L}} = 1$$

$\vec{k}\cdot\vec{L}$ muß berechnet werden, aufgrund der Schiefwichtigkeit

Vorricht gittere, denn \vec{a}_i sind nicht \perp aufeinander

$$\vec{L} = u_1^{\max} \vec{a}_1 + u_2^{\max} \vec{a}_2 + u_3^{\max} \vec{a}_3$$

\vec{k} = würde man gern so aufspannen daß

$$\vec{k} = \sum_i k_i \vec{b}_i, \text{ so daß } \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j \sim \delta_{ij}$$

Ansatz f. $\{\vec{b}_i\}$:
$$\vec{b}_i = \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)} 2\pi$$

$$(i, j, k) = (1, 2, 3) = (x, y, z)$$

zyklisch definiert

$$\rightarrow \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad |\vec{b}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$\{\vec{a}_i\}$ spannen den Raum der Gittervektoren \vec{R}_u auf

$\{b_j\}$ spannen den Raum der reziproken Gittervektoren \vec{k}_n auf

$e^{i\vec{k}\cdot\vec{L}} = 1$ sollte beachtet werden

$$\vec{k}\cdot\vec{L} = \sum_i k_i \frac{\vec{b}_i}{|\vec{b}_i|} \cdot \sum_j u_j^{\max} \vec{a}_j = \sum_{i=1}^3 u_i^{\max} k_i \underbrace{|\vec{b}_i|}_{\Rightarrow |\vec{a}_i|} = a_i$$

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{L}} = \underbrace{e^{i u_1^{\max} k_1 a_1}}_1 \cdot e^{i u_2^{\max} k_2 a_2} \cdot e^{i u_3^{\max} k_3 a_3}$$

$$\rightarrow k_i = u_i \frac{2\pi}{L_i} \quad (a_i, u_i^{\max} a_i = L_i)$$

Die mögl. k_i -Werte beginnen bei $k_i = 0$ und werden nach \pm im Abstand von $\frac{2\pi}{L_i}$ aufgefüllt.

Abstand ist festgelegt!

Gibt es ein maximales \vec{k} ? \rightarrow aus Bloch Theorem

$$\varphi(\vec{r} + \vec{a}_i) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_i} \varphi(\vec{r})$$

$$\begin{aligned}
 &= e^{i \vec{k} \cdot \vec{a}_i + i 2\pi} \varphi(\vec{r}) \\
 &= e^{i \vec{k} \cdot \vec{a}_i + i \vec{b}_i \cdot \vec{a}_i} \varphi(\vec{r}) \\
 &= e^{i \underline{\underline{(\vec{k} + \vec{b}_i)}} \cdot \vec{a}_i} \varphi(\vec{r})
 \end{aligned}$$

Alle \vec{k} sind äquivalent wenn sie sich um eine reziproke Gittervektor unterscheiden.

Die kürzesten reziproken Gittervektoren sind $\{\vec{b}_i\}$

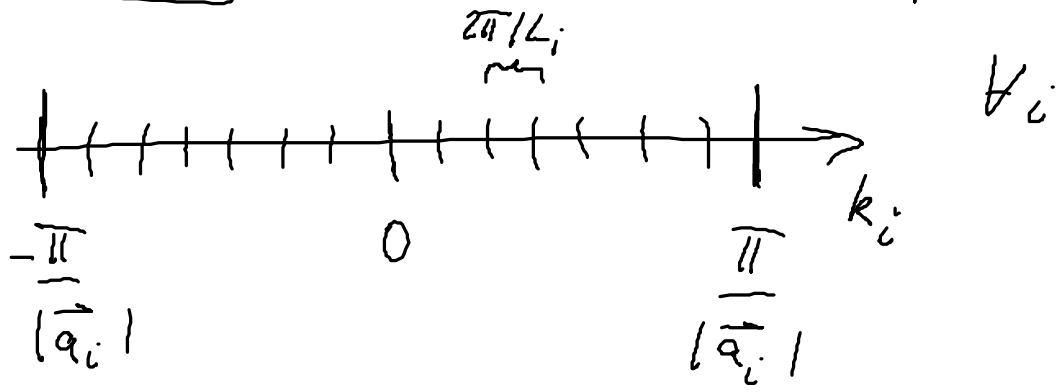
$$|\vec{b}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

Es ergibt sich eine Periodizität bzw. Äquivalenz der Wellenfunktion, wenn $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{b}_i$. Man kann also nur die Physik auf einem Intervall von

$$\left[-\frac{\pi}{|\vec{a}_i|}, \frac{\pi}{|\vec{a}_i|} \right] \text{ betrachten (in jeder Richtung).}$$

1. Brillouinzone

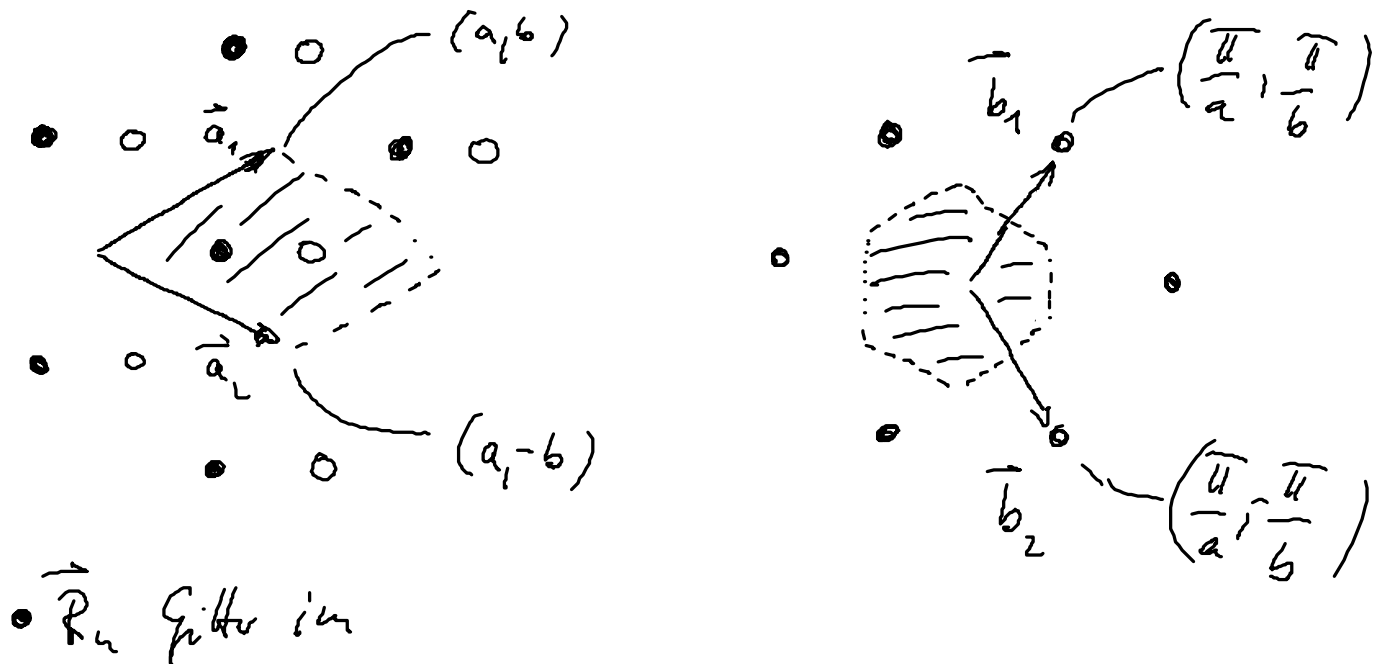
insgesamt : Quantenzahl k der Blochfunktion:



Es gilt also $\frac{2\pi}{|a_i|} / \left(\frac{2\pi}{|a_i|} u_i^{\max} \right) = u_i^{\max}$ k -Werte

f. der Blochfunktion, damit ist k als Quantenzahl der Blochfkt. festgelegt. Die Anzahl der mögl. k -Werte $\hat{=}$ Anzahl der Elementarzellen im Ortsraum.

c) einfaches Beispiel: Graphenstruktur



direkt Raum
mit einer
2 atomige Basis
(\bullet \circ)

k -Gitter im
reziproken Raum

Konstruktion der 1. Brillouinzone

$-\pi < \vec{k} \cdot \vec{a}_i \leq \pi \stackrel{\Delta}{=} \text{Bestimmungsgleichung für die}$
1. Brillouinzone

$$-\pi < \sum_j k_j \frac{\vec{b}_j}{|\vec{b}_j|} \cdot \vec{a}_i \leq \pi$$

$$-\pi < k_i \frac{2\pi}{|\vec{b}_i|} \leq \pi$$

$$-\frac{|\vec{b}_i|}{2} < k_i \leq \frac{|\vec{b}_i|}{2}$$

Man findet die $\{\vec{b}_i\}$ und halbieren die Fußformung
zu Koordinatenursprung, ziehen Ebenen \perp dazu:
innerhalb liegt die 1. BZ.

2.2. Bandstrukturrechnung: Tight Binding Model

\vec{k} ist festgelegt, benötige aber $\varepsilon(\vec{k})$

$$H_{el}(\vec{r}, \vec{p}) \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \underline{\varepsilon(\vec{k})} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

gesucht sind ε, φ : $\varphi_{\vec{k}}$ sind Blochfunktionen

die Blochfunktion soll nach Atomorbitalen der isoliert Atom entwickelt werden (LCAO), der Überlapp der Orbitale erzeugt dann die Festkörpereigenschaften (siehe k's).

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \sum_i c_i w_i(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Normierung f.
N Zellen
auf die
 \vec{R}_n zeigt

Erweiterungskoeffizienten für i-tes Orbital
in der n-ten Zelle,

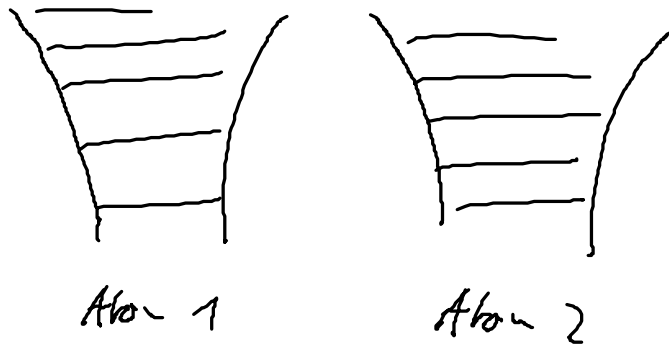
Orbital $i = 1 \dots N_0$ sind entweder
Orbitale eines oder mehr Atome wenn
eine Elementarzelle mit Basis vorliegt

Sorgt f. die
Erfüllung des Bloch Theorems

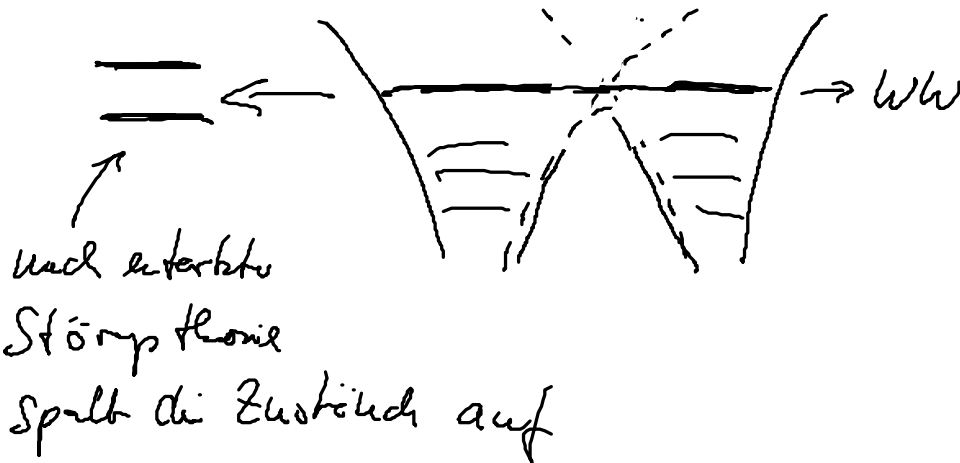
$$\psi(\vec{r} + \vec{e}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}} \psi(\vec{r})$$

↑
Translationsvektor

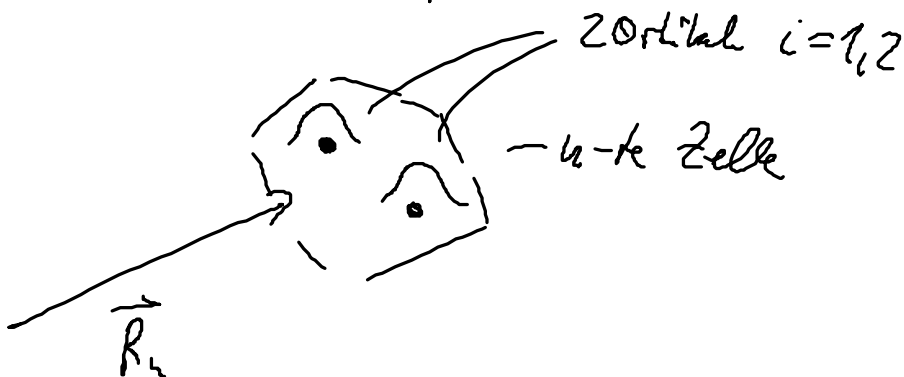
Vorstellung:



isoliert



Zusammen



Einsetzen des Ansatzes in die Schrödingergleichung

$$H_{el}(\vec{r}|\vec{p}) \sum_{R_n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \sum_i c_i w_i(\vec{r} - \vec{R}_n) =$$

$$\varepsilon(k) \sum_{R_n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \sum_i c_i w_i(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

c_i 's sind unbekannt, Versuch eine Matrixgleichung

aufzustellen $\left| \begin{array}{l} w_j^*(\vec{r} - \vec{R}_m) \cdot \int d^3r \end{array} \right.$

$$\sum_{R_n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \sum_i c_i \underbrace{\int d^3r w_j^*(\vec{r} - \vec{R}_n) H_{el}(\vec{r}|\vec{p}) w_i(\vec{r} - \vec{R}_n)}_{H_{ji}^{un}} =$$

$$\varepsilon(k) \sum_{R_n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \sum_i c_i \underbrace{\int d^3r w_j^*(\vec{r} - \vec{R}_n) w_i(\vec{r} - \vec{R}_n)}_{\sum_n \delta_{ij} + \text{Korrektur}}$$

Tight Binding / Nächste Nachbarn:

Es existiert nur ein Überlapp zwischen Orbitalen von
 nächster Nachbarn, nur wenn immer führender Term
 mit. \longrightarrow

$$\sum_n e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)} \sum_i c_i H_{ij}^{un} = \varepsilon(k) c_j$$

- Matrixgleichung f. Vektor \vec{c} , und $\epsilon(k)$ sind Eigenwerte
- Das Problem der Lösung der Schrödingergl. ist damit auf ein Eigenwertproblem zurückgeführt.
- $\epsilon(k), \vec{c}$ dürfen nicht von \vec{R}_n abhängen
 \rightarrow einfachste $\vec{R}_n = \vec{0}$ wählen

diskutiere die Matrixelemente:

$$(a) H_{ij}(R_n=0) = \int d^3r w_j^*(\vec{r}) H_{el} w_i(\vec{r})$$

$$\int d^3r w_j^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{Atom}(\vec{r}) + \Delta V_G(\vec{r}) \right) w_i(\vec{r})$$

$$\Delta V_G = \sum_{R_n} V_{ion}(|\vec{r} - \vec{R}_n|)$$

$$H_{ij}(R_n=0) = \epsilon_i \delta_{ij} + \int d^3r w_j^*(\vec{r}) \Delta V_G(\vec{r}) w_i(\vec{r})$$

$$= \underbrace{\epsilon_i \delta_{ij}}_{\text{dominants Term}} + \beta_{ij}$$

dominants Term

$$\begin{aligned}
 (b) \quad H_{ij} (R_n \neq 0) &= \int d^3r w_i^*(r) \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_{\text{loc}}(\vec{r}) + \Delta V_0 \right) w_j(\vec{r} - \vec{R}_n) \\
 &= \underbrace{\varepsilon_i \int d^3r w_i^*(\vec{r}) w_j(\vec{r} - \vec{R}_n)}_{\delta_{n,0} \rightarrow 0} + \underbrace{\int d^3r w_i^*(\vec{r}) \Delta V_0(\vec{r}) w_j(\vec{r} - \vec{R}_n)}_{t_{ij}}
 \end{aligned}$$

Man erhält:

$$(\varepsilon(k) - \varepsilon_j) c_j = \sum_i \underbrace{\left(\sum_{R_n \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} t_{ij}(R_n) + \beta_{ij} \right)}_{H_{ij}} c_i$$

Das ist die Eigenwertgleichung

f. $\varepsilon(k)$.