

Wiederholung Tight-Binding:

Ansatz:

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_0)} \sum_m c_{m\ell} \phi_{m\ell}(x - R_n - x_0)$$

Reduz

Bestimmungsgleichung:

$$(E_{\lambda k} - E_{n\ell}) c_{n\ell} = \sum_{n_2} \left(\sum_{\substack{R_{n_2} \\ \ell_2}} e^{ik \cdot (R_{n_2} + x_0 - x_0)} c_{n_2 \ell_2} + \beta_{n\ell} c_{n\ell} \right) c_{n\ell}$$

Fortsatzung

Nach Bestimmung der Eigenwerte $E_{\lambda k}$ und Eigenvektoren $\{c_{m\ell}(k)\}$ kann man die Blochfunktion bestimmen:

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_0)} \sum_m c_{m\ell} \phi_{m\ell}(x - R_n - x_0) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N} \sqrt{\Omega}} e^{ikx} \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_0 - x)} \sum_m c_{m\ell} \phi_{m\ell}(x - R_n - x_0) \sqrt{\Omega} \end{aligned}$$

$u_{k,\lambda}(x)$

Überprüfe $u_{k,\lambda}$ die Eigenschaft erfüllt:

$$u_{k,\lambda}(x) = u_{k,\lambda}(x + R)$$

$$\begin{aligned} \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_0 - x)} \sum_m c_{m\ell} \phi_{m\ell}(x - R_n - x_0) &= \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_0 - x - R)} \sum_m c_{m\ell} \phi_{m\ell}(x - R_n - x_0 + R) \\ &= \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_0 - x)} \sum_m c_{m\ell} \phi_{m\ell}(x - R_n - x_0) \end{aligned}$$

Indexverschiebung
 $R_n \rightarrow R_n + R$

qed

Einfaches Beispiel

1-dimensionale Kette



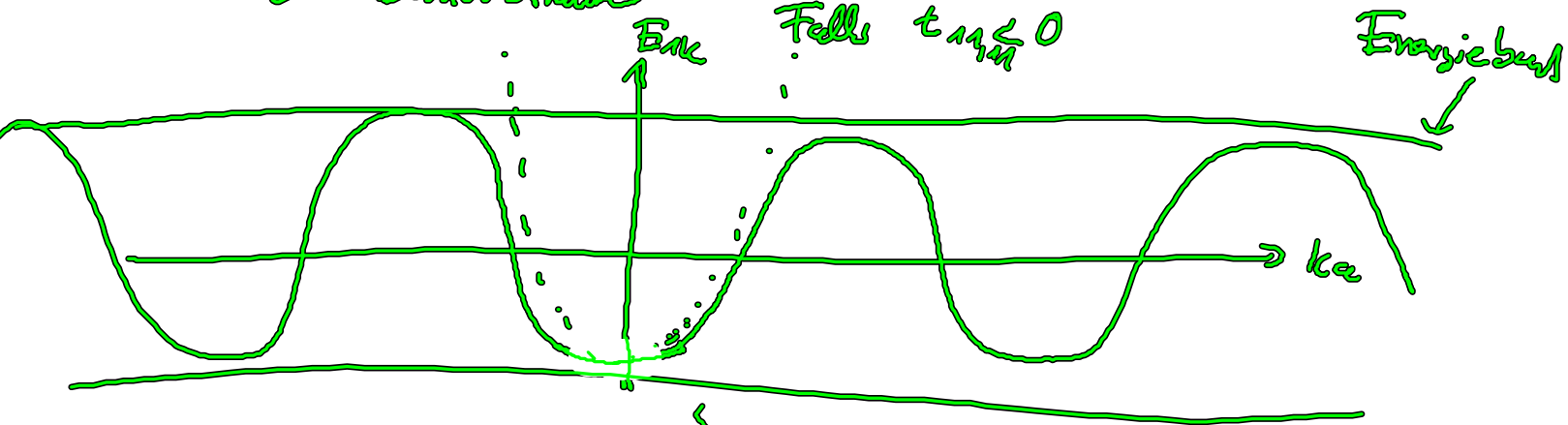
Kopplung zu nächsten Nachbarn

(i) einatomige Basis, ein Level pro Atom

$$(E_{1k} - E_{11}) c_{11}^k = \underbrace{(e^{ika} + e^{-ika})}_{2 \cos ka} (t_{11,11} + \beta_{11,11}) c_{11}^k$$

$$\Rightarrow E_{1k} = E_{11} + \beta_{11,11} + 2 t_{11,11} \cos ka$$

\Rightarrow Bandstruktur



Lücke, verboten das Elektron zu besetzen

Für kleine k um Minimum gilt die typische Banddispersion:

$$E_{1k} = \underbrace{E_{11} + \beta_{11,11} + 2 t_{11,11}}_{\text{konstante}} + \underbrace{t_{11,11} a^2 k^2}_{\text{Parabolisches Band}}$$

$$\| \epsilon_1(k) = E_1(k) = \tilde{E} + t_{11,11} a^2 k^2 \|$$

Ähnlich zu freien Elektronen, aber Elektron > dem: sich ähnlich bewegen wie ungebundene El. nur mit anderer Masse.

(ii) zwei atomige Basis



$$(E_k - E_{121}) c_{121}^k = \left(\sum_n e^{ik \cdot (R_n + r_2 - r_1)} t_{121n} + \beta_{121n} \right) c_{12}^k$$

$e^{ik a} t_{121n} + e^{-ik a} t_{121n}$



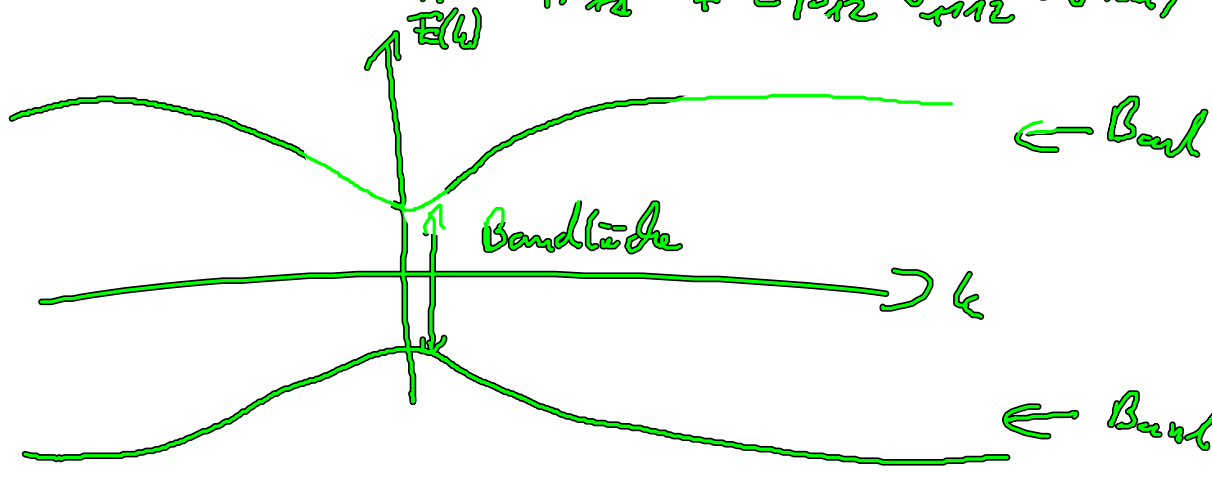
$$\det \begin{pmatrix} E_k - E_{11} & t_{112} e^{-ik a} + \beta_{112} \\ t_{121} e^{ik a} + \beta_{121} & E_k - E_{22} \end{pmatrix} = 0$$

Einfacher Fall identische Atome $E_{11} = E_{22}$

$$E(k) = E_k = E_{11} \pm \left(|t_{112}|^2 + |\beta_{112}|^2 + \beta_{112} t_{112} e^{-ik a} + \beta_{121} t_{121} e^{ik a} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= E_{11} \pm \left(|t_{112}|^2 + |\beta_{112}|^2 + 2 \beta_{112} t_{112} \cos ka \right)^{\frac{1}{2}}$$

erlaubt Bereich



erlaubt Bereich

Die Kopplung führt bei ein zwei atomigen Basis mit ein Orbital zu ein Aufspaltung.

Durch die periodische Anordnung im Kristall gibt es kontinuierlich Eigenzustände in unterschiedlichen k .

Bemerkung:

Übersicht über weitere Methoden

(1) Methoden die nach Elektronen korrekturen entwickeln (Mean Field Methoden) unterste Approximationsstufe:

Hertze-Fock, ...

(2) Density-Functional-Theorie

(UdA: Statt Wellenfunktion zu betrachten, wird die Funktionen der Elektronendichte dargestellt, Energie funktional wird variiert.)

(3) Pseudo-Potential-Methoden: Elektronen überspringt Atomkern und Valenzelektronen entstehen, Einfluß des Kerns mit effektiven Pseudopotential auf die Valenzelektronen beschreiben.

(4) k.p Theorie - - - -

III.5 Effektive Massennäherung und Gruppengeschwindigkeit von Elektronen

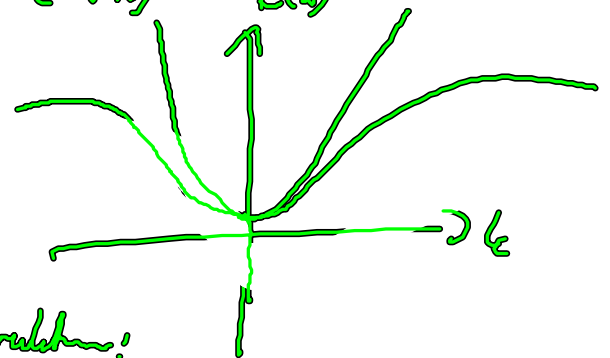
Erklärung an TB wir können die Banddispersion an bestimmten Punkten im k -Raum (Extrema) in der Form (1D) $E(k)$

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

ähnlich der freien Teilchen

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

\Rightarrow Wir brauchen ein systematisches Konstruktions!



das effektiven Massen tensor.

! da: Band dispersion um ein klein Störung entwickeln

$$E_{\lambda}(k+q) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{die Tafel}}}{=} E_{\lambda}(k) + \sum_i \frac{\partial E_{\lambda}(k)}{\partial k_i} q_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_{\lambda}(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j + O(q^3)$$

Zurück zu Bestimmung für Blochfunktion $u_{\lambda k}(k)$

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} (\nabla + ik)^2 + V_0(k) \right]}_{H_k} u_{\lambda k}(k) = E_{\lambda}(k) u_{\lambda k}(k)$$

Dann

$$H_{k+q} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\nabla + ik + iq)^2 + V_0(k) = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_0} (\nabla + ik)^2}_{H_k} - \frac{\hbar^2}{m_0} (\nabla + ik) \cdot q + \frac{\hbar^2}{2m_0} q^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{dV_0}{dk} q$$

$$\| H_{k+q} = \underbrace{H_k}_{H_0} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{m_0} q \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla + k \right)}_{V_{k,q}} + \frac{\hbar^2}{2m_0} q^2 \|$$

\Rightarrow Störzustand

$$H_{k+q} u_{\lambda k} = \underbrace{E_{\lambda}(k)}_{E_{\lambda}(k)} u_{\lambda k}$$

$$\begin{aligned} E_{\lambda}(k+q) &= E_{\lambda}(k) + \sum_i \int dx u_{\lambda k}^*(k) \underbrace{\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{1}{i} \nabla + k \right)_i q_i}_{V_{k,q} \text{ nur Term hier in } q} u_{\lambda k}(k) \\ &+ \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{\left| \int dx u_{\lambda' k}^*(k) \left(\frac{1}{i} \nabla + k \right) \cdot q u_{\lambda k}(k) \right|^2}{(E_{\lambda' k}(k) - E_{\lambda k}(k))} \\ &+ \underbrace{\int dx u_{\lambda k}^*(k) \frac{\hbar^2}{2m_0} q^2 u_{\lambda k}(k)}_{\frac{\hbar^2}{2m_0} q^2} + O(q^3) \end{aligned}$$

Vergleich der Vorfaktoren hier in q :

$$\frac{\partial E_{\lambda}(k)}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{m} \int dx u_{\lambda k}^*(k) \left(\frac{1}{i} \nabla + k \right) u_{\lambda k}(k)$$

Übertragung auf Blochzustände

$$\left\| \frac{\partial E_2(k)}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \psi_{1k}^*(x) \frac{1}{i} \nabla \psi_{2k}(x) \right\|$$

Interpretation: Durchschnittsgeschwindigkeit $v = \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} [v, H] = \frac{p}{m}$ → Gruppengeschwindigkeit oder Impuls

Also Ableitung der Banddispersion ist Durchschnittsgeschwindigkeit!
Wir vergleichen jetzt die Terme in der Ordnung q^2 .

$$\sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_2(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{\lambda \neq 1} \frac{\left| \int dx \psi_{\lambda k}^*(x) \frac{\hbar^2}{m} \nabla \cdot (\frac{1}{i} \nabla \psi_{1k}(x)) \right|^2}{E_1(k) - E_{\lambda}(k)}$$

$$\sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_2(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{\lambda \neq 1} \frac{\left| \int dx \psi_{\lambda k}^*(x) \frac{\hbar^2}{m} \nabla \cdot (\nabla \psi_{1k}(x)) \right|^2}{E_1(k) - E_{\lambda}(k)}$$

$$P_{\lambda \mu k} = \int dx \psi_{\lambda k}^*(x) \frac{\hbar^2}{m} \nabla \cdot \psi_{\mu k}(x)$$

$$\left\| \left(\frac{1}{m_{eff}} \right)_{ij} = \frac{\partial^2 E_2(k)}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\hbar^2}{m} \delta_{ij} + \sum_{\lambda \neq 1} \frac{1}{2} \frac{(P_{\lambda 1 k})_i (P_{\lambda 1 k})_j + (P_{\lambda 1 k})_j (P_{\lambda 1 k})_i}{E_1(k) - E_{\lambda}(k)} \right\|$$

effektiv in Approximation!

Sei k_0 ein Punkt hoher Symmetrie.

$$E_2(k_0 + k) = E_1(k_0) + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2} k_i \left(\frac{1}{m_{eff}} \right)_{ij} k_j$$

Für isotropes Band $\left(\frac{1}{m_{eff}}\right)_{ij} = \frac{1}{m_{eff}} \delta_{ij}$

Effektive Masse kann positiv oder negativ sein

Bei verbotenen Band mit negativer Masse

läuft man in falsche Richtung als Loch

mit umgekehrter Energie also positiver Mom.

und umgekehrter Ladung und umgekehrter Impuls ad.

