

Wiederholung Tight-Binding:

Ansatz:

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

Reduz

Bestimmungsgleichung:

$$(E_{\lambda k} - E_{m'l'}) c_{m'l'}^k = \sum_{m_e} \left(\sum_{\substack{R_n \neq 0 \\ l' \neq l}}^N e^{ik \cdot (R_n + x_e - x_{e'})} \alpha_{m'l'm_e} + \beta_{m'l'm_e} \right) c_{m_e}^k$$

Fortsetzung

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

$$\begin{aligned} \psi_{\lambda,k}(x) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_n}^N e^{ik \cdot (R_n + x_e)} \sum_m c_{me} \phi_{me}(x - R_n - x_e) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N} \sqrt{\Omega}} e^{ik \cdot x} \sum_{R_n}^N e^{ik \cdot (R_n + x_e - x)} \sum_m c_{me} \phi_{me}(x - R_n - x_e) \sqrt{\Omega} \end{aligned}$$

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

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

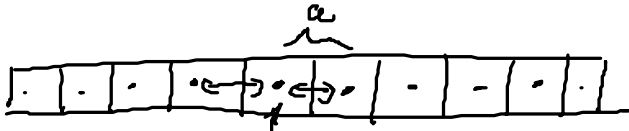
$$u_{\lambda,k}(x) = u_{\lambda,k}(x + R)$$

$$\begin{aligned} \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_e - x)} \sum_m c_{me} \phi_{me}(x - R_n - x_e) &= \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_e - x - R)} \sum_m c_{me} \phi_{me}(x - R_n - x_e + R) \\ &\quad \text{Indexverschiebung } R_n \rightarrow R_n + R \\ &= \sum_{R_n} e^{ik \cdot (R_n + x_e - x)} \sum_m c_{me} \phi_{me}(x - R_n - x_e) \end{aligned}$$

qed

Einfaches Beispiel

1-dimensionale Kette



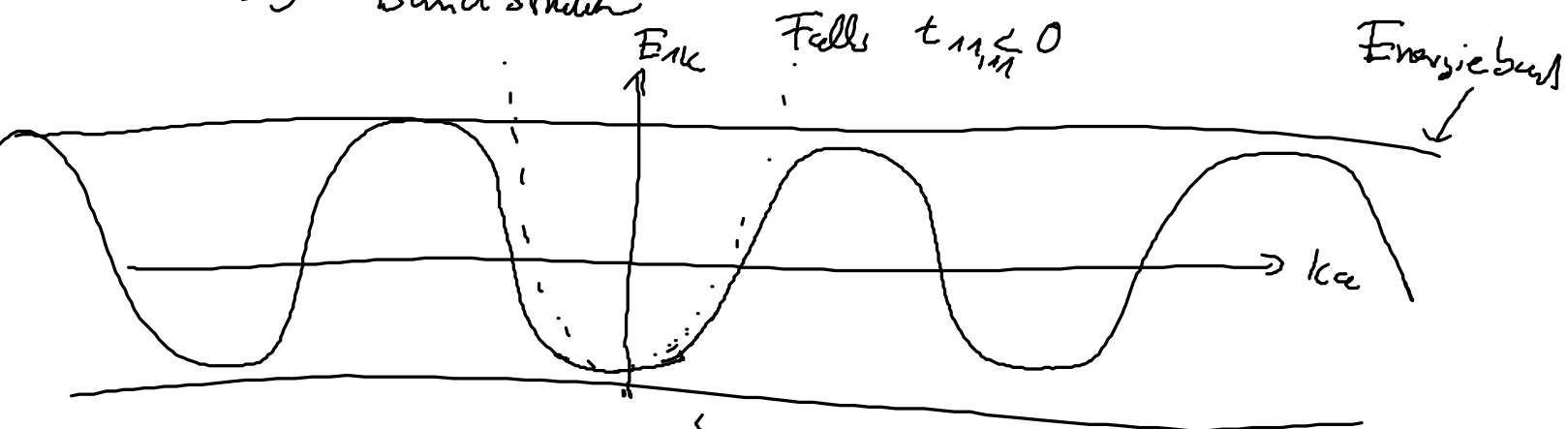
Kopplung in nächste Nachbar

(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 dass Elektron zu besetzen

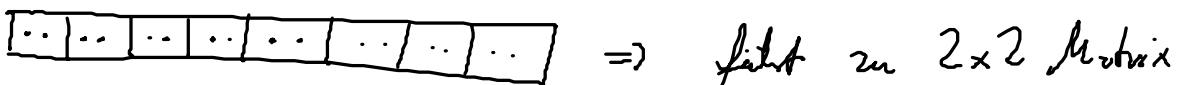
Für kleine k um Minimum gilt die typische Banddispersion:

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

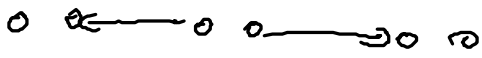
$$\| \Sigma_1(k) = E_1(k) = \tilde{E} + t_{11,11} a^2 k^2 \|$$

Ähnlich zu freien Elektronen, aber Elektron > dem sie ähnlich bewegen wie ungebundenes El. nur mit anderer Masse.

(ii) zwei atomige Basis



$$(E_k - E_{1e'}) c_{1e'}^k = \left(\sum_n e^{ik \cdot (R_n + x_2 - x_1)} t_{12} + \beta_{12} \right) c_{1e}$$



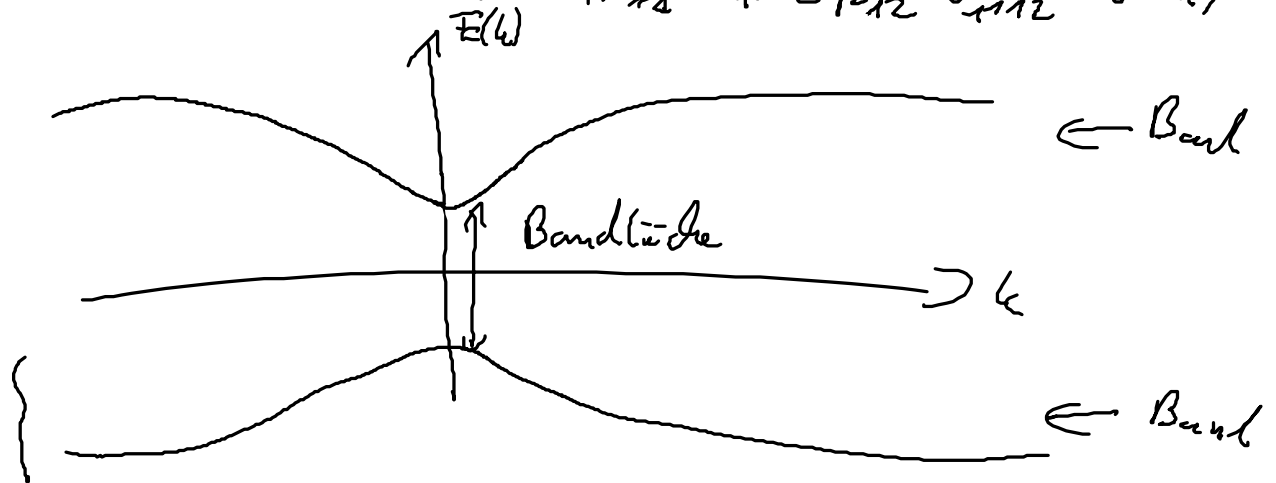
$$\det \begin{pmatrix} E_k - E_{11} & t_{12} e^{-ika} + \beta_{12} \\ t_{12} e^{ika} + \beta_{12} & E_k - E_{12} \end{pmatrix} = 0$$

Einfacher Fall identische Atome $E_{11} = E_{12}$

$$E(k) = E_k = E_{11} \pm \left(|t_{12}|^2 + |\beta_{12}|^2 + \underbrace{\beta_{12} t_{12} e^{-ika} + \beta_{12} t_{12} e^{ika}}_{\text{reell}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= E_{11} \pm \left(|t_{12}|^2 + |\beta_{12}|^2 + 2\beta_{12} |t_{12}| \cos ka \right)^{\frac{1}{2}}$$

erlaubter Bereich



erlaubter Bereich

Die Kopplung führt bei einem zweiatomigen Gitter mit einem Orbital zu einer Aufspaltung.

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

Bemerkung:

Übersicht über weitere Methoden

- (1) Methoden die nach Elektronen korrektur entwickeln (Mean Field Methoden) unterste Approximationsstufe:
Hartree-Fock, ...
- (2) Density-Functional-Theorie
(Idee: Statt Wellenfunktion zu betrachten, wird die Funktional der Elektronendichte dargestellt, Energie funktional wird variiert.)
- (3) Pseudo-Potential-Methoden: Elektronen außerhalb Atome nahe Kern als Valenzelektron aufteilen, Einfluß des Kerns mit effektiven Pseudopotential auf die Valenzelektronen beschreiben.
- (4) $k \cdot p$ Theorie - - - -

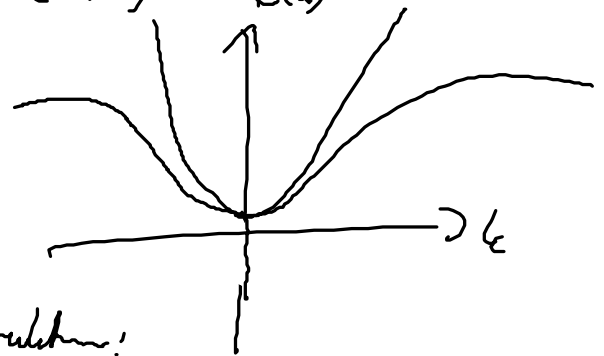
III.5 Effektive Massennäherung und Geschwindigkeit von Elektronen

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 dem freien Teilchen

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



\Rightarrow Wir brauchen eine systematische Konstruktion!

des effektiven Massentensor.

! da: Banddispersion um eine kleine Störung entwickelt

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

Zurück zu Bestimmungsgl für Blochfkt $u_{\lambda k}(\underline{r})$

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

Dann

$$H_{\underline{k}+\underline{q}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\nabla + i\underline{k} + i\underline{q})^2 + V_0(\underline{r}) = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_0} (\nabla + i\underline{k})^2}_{H_{\underline{k}}} - \frac{\hbar^2}{m_0} (\nabla + i\underline{k}) \cdot \underline{q} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \underline{q}^2 + \underbrace{V_0(\underline{r})}_{V_{\underline{k}, \underline{q}}}$$

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

\Rightarrow Störsystem

$$H_{0, \underline{k}} u_{\lambda k} = \underbrace{E_{\lambda}^0(\underline{k})}_{E_{\lambda}(\underline{k})} u_{\lambda k}$$

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

Vergleiche der Vorfaktoren linear in \underline{q} :

$$\frac{\partial E_{\lambda}(\underline{k})}{\partial k_i} = \frac{\hbar^2}{m} \int d\underline{r} u_{\lambda k}^*(\underline{r}) \left[\frac{1}{i} \nabla + \underline{k} \right]_i u_{\lambda k}(\underline{r})$$

Übertrag auf Blochwellenfunktion

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

Interpretation: Durchschnittsgeschwindigkeit $v = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}, H] = \frac{\mathbf{p}}{m}$ → Geschwindigkeit oder Impuls

Also Ableitung der Banddispersion ist Durchschnittsgeschwindigkeit!

Wir vergleichen jetzt die Terme in der Ordnung q^2 .

$$\sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_x(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{x \neq 1} \frac{\left| \int d\mathbf{r} \psi_{1\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{m} \nabla \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla \psi_{x\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right) \right|^2}{E_x(\mathbf{k}) - E_{x1}(\mathbf{k})}$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_x(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{x \neq 1} \frac{\left| \int d\mathbf{r} \psi_{1\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{m} \nabla \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla \psi_{x\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right) \right|^2}{E_x(\mathbf{k}) - E_{x1}(\mathbf{k})}$$

$$P_{x11\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \psi_{1\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{i} \nabla \psi_{x1\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\left\| \left(\frac{1}{m_{\text{eff}}} \right)_{ij} = \frac{\partial^2 E_x(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\hbar^2}{m_0} \delta_{ij} + \sum_{x \neq 1} \frac{1}{2} \frac{\left((P_{x11\mathbf{k}})_i (P_{x11\mathbf{k}})_j + (P_{x11\mathbf{k}})_j (P_{x11\mathbf{k}})_i \right)}{E_x(\mathbf{k}) - E_{x1}(\mathbf{k})} \right\|$$

effektive Massentherorie!

Sei \mathbf{k}_0 ein Punkt hoher Symmetrie.

$$E_x(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) = E_x(\mathbf{k}_0) + \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2} k_i \left(\frac{1}{m_{\text{eff}}} \right)_{ij} k_j$$

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

Effektive Masse kann positiv oder negativ sein

Bei vollbesetzten Band mit negativer Masse

faßt man ein fehlendes Elektron als Loch

mit umgekehrter Energie also positive Mom.

und umgekehrter Ladung und umgekehrtem Impuls an.

