

# Wiederholung Ergebnis Tight Binding:

Bestimmungsgl der Tight-Binding Parameter

$$\left\| (E_{\lambda k} - E_m^0) c_{m, \lambda}^k = \sum_{m'} \left( \sum_{\substack{n=0 \\ \neq \lambda}}^N e^{i k \cdot (R_n + r_e - r')} t_{n, \lambda}^m + \beta_{m, \lambda}^m \right) c_{m'}^k \right\|$$

für den Tight Binding - Ansatz

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + r_e)} \sum_m c_{m, \lambda} \phi_{m, \lambda}(x - R_n - r_e)$$

Weiter:

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i k \cdot x} \underbrace{\sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + r_e - x)} \sum_m c_{m, \lambda} \phi_{m, \lambda}(x - R_n - r_e)}_{u_{k, \lambda}(x) \sqrt{N}}$$

Überprüfen ob  $u_{k, \lambda}(x)$  die Eigenschaft der Blochfunktion erfüllt:

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

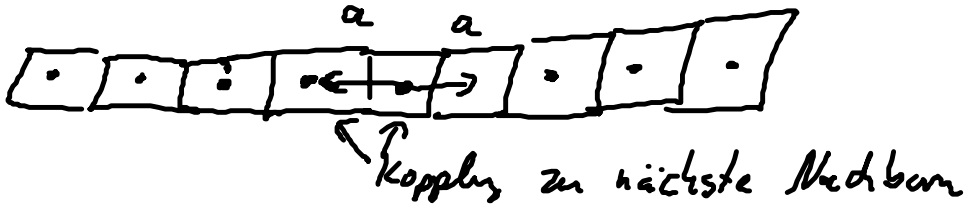
$$\sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + r_e - x)} \sum_m c_{m, \lambda} \phi_{m, \lambda}(x - R_n - r_e) \stackrel{!}{=} \sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + r_e - x - R)} \sum_m c_{m, \lambda} \phi_{m, \lambda}(x - R_n - r_e + R)$$

verschiebe Summe

$$= \sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + r_e - x)} \sum_m c_{m, \lambda} \phi_{m, \lambda}(x - R_n - r_e)$$

## Einfaches Beispiel

1-dimensionale Kette



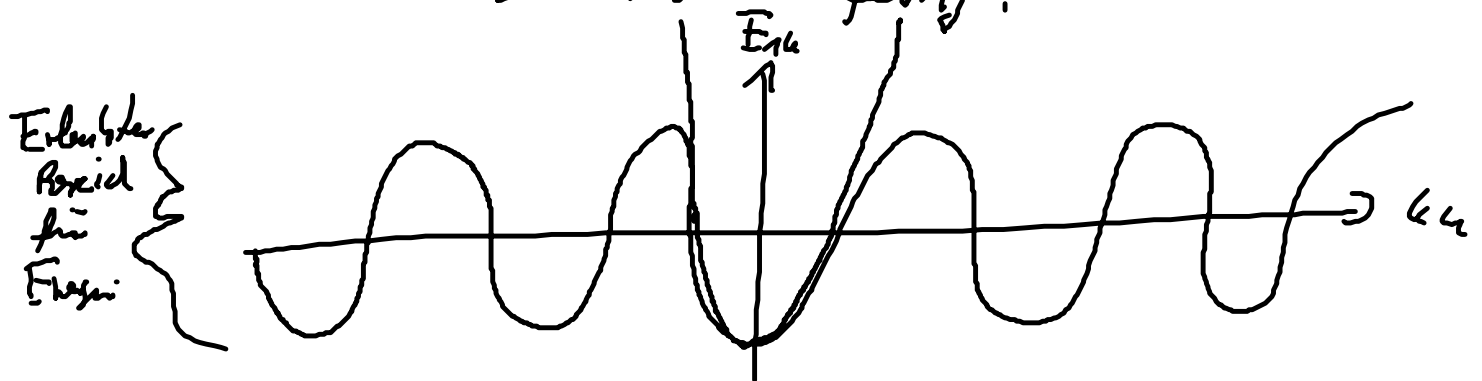
(i) einatomige Basis ( $l=1$ )

Wir berücksichtigen zwei Level pro Atom

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

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

$\Rightarrow$  Bandstruktur fertig!



Lücke, verboten!

Für kleine  $k$  um das Minimum gilt <sup>das</sup> typische Banddispersion:

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

$$\| \epsilon_1(k) = E_1(k) = \bar{E} + t_{11,11} a^2 k^2 \| \text{ Dispersionselemente in 1D-Fest.}$$

Ähnliche Dispersionselemente wie das freie Elektronen. Elektronen sehen sich ähnlich zu bewegen, aber mit modifizierter Masse.

(ii) zwei Atomige Basis (ähnliches bei zwei Zustände je Atom)



$\Rightarrow$  führt zur  $2 \times 2$  Matrix  
und zwei Bändern

$$(E_1(k) - E_{1e'}) c_{1e'} = \left( \sum_{e''} e^{ik \cdot (R_{1e'} + R_{e''} - R_{e'})} t_{1e''1e'} + \beta_{1e'1e'} \right) c_{1e}$$

$$0 \leftarrow 0 \rightarrow 0 \leftarrow 0 \rightarrow 0 \leftarrow 0 \rightarrow 0$$

$e^{ika} t_{1112} + e^{-ika} t_{1112}$   
 muss symmetrisch sein.

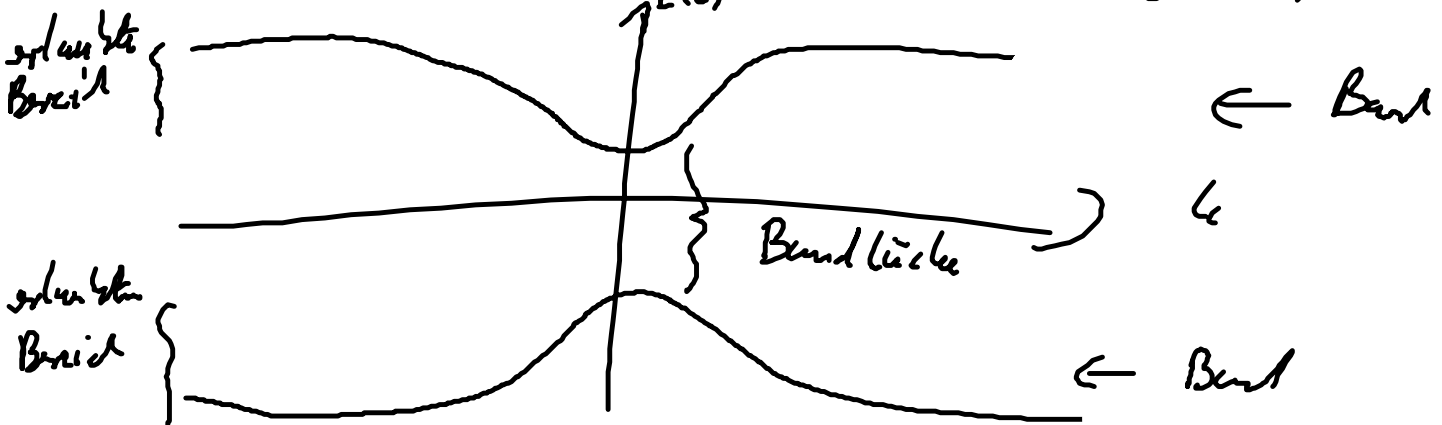
$$\det \begin{pmatrix} E(k) - E_{11} & t_{1112} e^{-ika} + \beta_{12} \\ t_{1211} e^{ika} + \beta_{21} & E(k) - E_{12} \end{pmatrix} = 0$$

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

$$E(k) = E(k) = E_{11} \pm \left( |t_{1211}|^2 + |\beta_{12}|^2 + \beta_{12} t_{1112} e^{-ika} + \beta_{21} t_{1211} e^{ika} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= E_{11} \pm \left( |t_{1211}|^2 + |\beta_{12}|^2 + 2 \beta_{12} t_{1112} \cos(ka) \right)^{\frac{1}{2}}$$

reell



Die Kopplung der nearesten Basis führt zur einer Aufspaltung.

Durch die periodische Anordnung bilden die Eigenzustände mit unterschiedlichen  $k$  Bänder.

Bänder können durch Bandlücken in dem k-Raum getrennt sein! (Bandlücken)

Bandstruktur 2D Gitter Graphen  $\Rightarrow$   $\tilde{u}$  +

Bemerkung:

$\tilde{u}$  blickt über weitere Methoden

(1) Methoden die nach Elektronenkorrelationen entwickeln (Mean Field Methoden)  
unterste Approximationsstufe: Hartree Fock (singles), ... ..  
doubles, coupled clusters  $\Rightarrow$  Full CI

(2) Density-Functional-Theorie

(Idee: Statt Wellenfunktion zu betrachten, wird alles als Funktional der Elektronendichte dargestellt, Energiefunktional wird variiert)

(3) Pseudo-Potential Methoden: Elektronen der Atome in Kern- und Valenzelektronen aufteilen, Einfluss des Kerns mit effektivem Pseudopotential auf die Valenzelektronen.

(4)  $k \cdot p$  Methoden

# III.5 Effektive Massennäherung und Geschwindigkeit der Elektronen

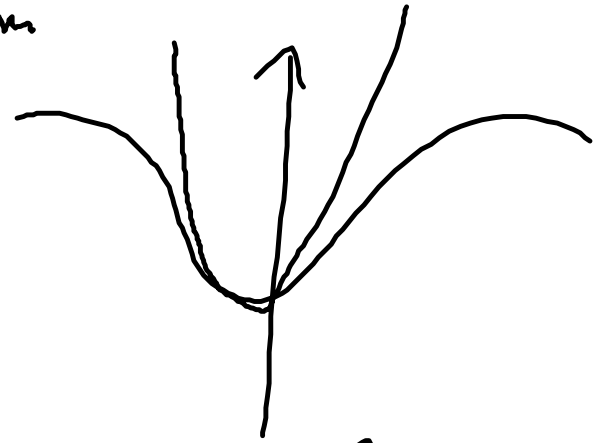
Wir haben bei der Tight-Binding Approximation gesehen, dass die Dispersionsrelation der Elektronen in der Nähe der Extrema, die Form

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

ähnlich der eines freien Teilchens

mit

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



Kann man etwas ähnliches auch für sel. andere Bänder konstruieren?

Man konstruiert den effektiven Massentensor:

Idee: Banddispersion um ein klein Störung entwickeln:

$$E_x(k+q) \stackrel{\text{Taylor}}{\approx} E_x(k) + \sum_i \frac{\partial E_x(k)}{\partial k_i} q_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_x(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j + O(q^3)$$

Zurück zur Bestimmungsgl. von  $u_{k+q}$

$$\underbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla + i\mathbf{k})^2 + V_0(\mathbf{r}) \right]}_{H_{\mathbf{k}}} u_{\mathbf{k}+q} = E_x(k) u_{\mathbf{k}+q}$$

Dann ist

$$H_{\mathbf{k}+q} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\nabla + i\mathbf{k} + i\mathbf{q})^2 + V_0(\mathbf{r})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\nabla + i\mathbf{k})^2 - \frac{\hbar^2}{m_0} (\nabla + i\mathbf{k}) \cdot (i\mathbf{q}) + \frac{\hbar^2}{2m_0} q^2 + V_0(\mathbf{r})$$

$$(a) \quad || H_{\underline{k}+\underline{q}} = \underbrace{H_{\underline{k}}}_{H_{0,\underline{k}}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{m_0} \underline{q} \cdot \left( \frac{1}{i} \nabla + \underline{k} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \underline{q}^2}_{V_{\underline{k},\underline{q}} \text{ Störterm}}$$

$\Rightarrow$  Störungstheorie

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

$$(4) \quad E_{\lambda}(\underline{k}+\underline{q}) = E_{\lambda}(\underline{k}) + \sum_i \int d\underline{r} u_{\underline{k}}^x(\underline{r}) \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{1}{i} \nabla + \underline{k} \right)_i \cdot q_i u_{\underline{k}}(\underline{r}) \\ + \sum_{i' \neq i} \frac{\int d\underline{r} u_{\underline{k}}^x(\underline{r}) \left( \frac{1}{i} \nabla + \underline{k} \right) \cdot \underline{q} u_{\underline{k}}(\underline{r})^2}{(E_{\lambda}(\underline{k}) - E_{\lambda'}(\underline{k}))} \\ + \underbrace{\int d\underline{r} u_{\underline{k}}^x(\underline{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \underline{q}^2 u_{\underline{k}}(\underline{r})}_{\frac{\hbar^2}{2m} \underline{q}^2} + O(\underline{q}^3)$$

Wir schreiben alle Terme auf, die linear in  $\underline{q}$  sind:

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

Auf die rechte Blockseite übertragen:

$$|| \frac{\partial E_{\lambda}(\underline{k})}{\partial \underline{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\underline{r} u_{\underline{k}}^x \left( \frac{1}{i} \nabla + \underline{k} \right) u_{\underline{k}} ||$$

Interpretation: Durchschnittsgeschwindigkeit

Geschwindigkeitsoperator!

$$v = \frac{d\underline{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\underline{r}, H] = \frac{\underline{p}}{m} = \frac{\hbar}{m} \nabla$$

Also die Ableitung der Banddispersion besteht aus der Durchschnittsgeschwindigkeit!

Jetzt können wir noch die Terme in der 2. Ordnung verstehen:

$$\sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_{\lambda}(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{|\int dx u_{\lambda'k}(k) \frac{\hbar^2}{m} q \cdot (\frac{1}{i} \nabla + k) u_{\lambda k}(k)|^2}{E_{\lambda}(k) - E_{\lambda'}(k)}$$

⇓ auf Blochfunktion umschreiben

$$\sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_{\lambda}(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{|\int dx \psi_{\lambda'k}^*(k) \frac{\hbar^2}{2m} q \cdot (\frac{1}{i} \nabla) \psi_{\lambda k}(k)|^2}{E_{\lambda}(k) - E_{\lambda'}(k)}$$

$$P_{\lambda \lambda' k} = \left| \int dx \psi_{\lambda'k}^*(k) \frac{\hbar^2}{2m} q \cdot (\frac{1}{i} \nabla) \psi_{\lambda k}(k) \right|^2$$

Damit ist der effektive Kreuz Tensor

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

Wir nehmen jetzt  $k_0$  als Punkt hoher Symmetrie an.

(Im Extrem in der Bandstruktur im Band)

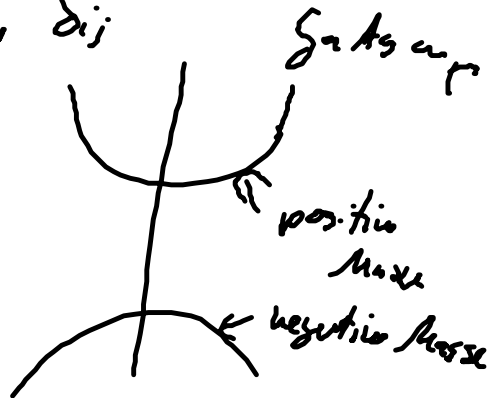
Dann gilt:

$$E_{\lambda}(k_0 + k) = E_{\lambda}(k_0) + \sum_{ij} \frac{\hbar^2}{2} k_i \left( \frac{1}{m_{\text{eff}}} \right)_{ij} k_j$$

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

$$E_{\lambda}(k_0 + k) = E_{\lambda}(k_0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{eff}}}$$

Effektive Masse kann negativ oder positiv sein!



Bowenby Ist das Band voll besetzt kann bei negativer Masse, ein fehlendes Elektron auch als Loch mit umgekehrter Energiecurve, Impuls und Ladung ~~erweitert~~ aufgefasst werden

### III.6 Nanostrukturen (Beispiele)

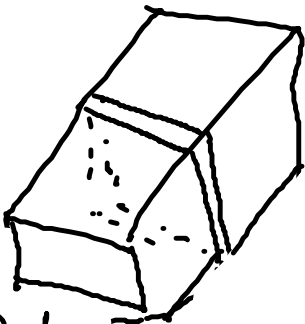
Wir haben gesehen, dass sich Elektronen in Kristallen wie ein modulierte Elektronen verhalten.

Idee: Resonanz ähnelnde Strukturen bauen und in diese die Elektronen einsperren! So dass sich stehende Wellen bilden!  
 $\Rightarrow$  Strukturen größer oder Elektronenwellenlänge!

#### Grundtypen

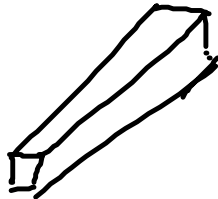
Halbleiter in 1D eingeschränkt

Quadrant well



Realisierung  
 z.B. zwei Halbleitermaterialien mit unterschiedlicher Bandlücke

Quantendot  
 in 2 Dimensionen eingeschränkt



Quantenpunkt



in 3 Dimensionen eingeschränkt.