

# Wiederholung Ergebnis Tight Binding:

Bestimmungsgl der Tight-Binding Parameter

$$\parallel (E_{\lambda k} - E_{n\lambda}) c_{n\lambda}^k = \sum_{n'} \left( \sum_{k_1=0}^N e^{i k_1 \cdot (R_n + k_1 - R_{n'})} t_{n\lambda, n'} + R_{n\lambda} \right) c_{n'}^k \parallel$$

für den Tight-Binding-Ausatz

$$\psi_k(z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + z)} \sum_n c_{n\lambda} \phi_{n\lambda}(z - R_n - z_0)$$

Weiter:

$$\psi_k(z) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i k \cdot z} \underbrace{\sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + z_0)} \sum_n c_{n\lambda} \phi_{n\lambda}(z - R_n - z_0)}_{\psi_{n\lambda}(z)}$$

Überprüfen ob  $u_{n\lambda}(z)$  die Eigenwerte der Blochfunktion erfüllt:

$$u_{\lambda k}(z) \stackrel{!}{=} u_{\lambda k}(z + R)$$

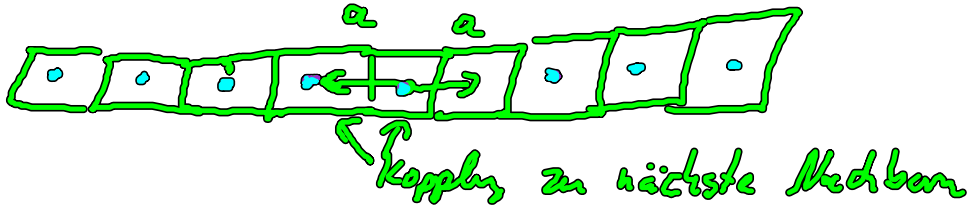
$$\sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + z_0 - z)} \sum_n c_{n\lambda} \phi_{n\lambda}(z - R_n - z_0) \stackrel{!}{=} \sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + z_0 - z - R)} \sum_n c_{n\lambda} \phi_{n\lambda}(z - R_n - z_0 + R)$$

verschiebe Summe

$$= \sum_{R_n} e^{i k \cdot (R_n + z_0 - z)} \sum_n c_{n\lambda} \phi_{n\lambda}(z - R_n - z_0)$$

Einfaches Beispiel

1-dimensionale Kette



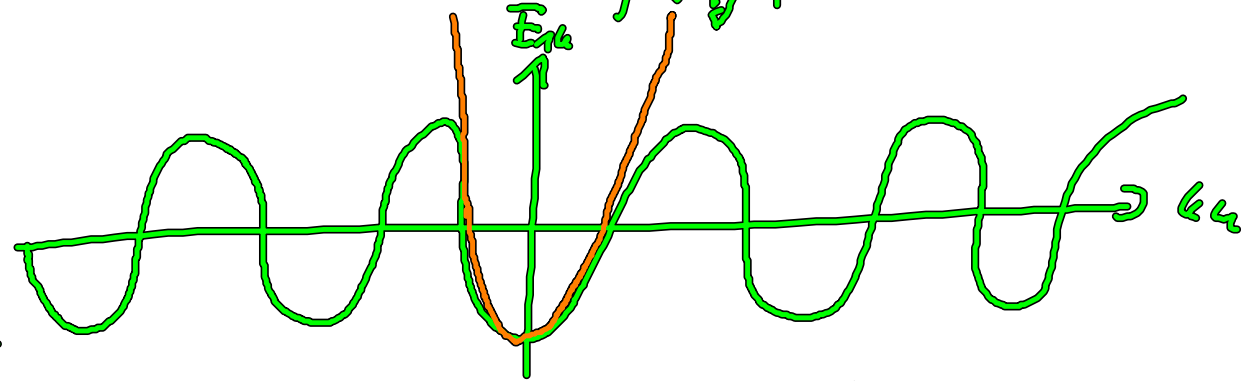
(i) einatomige Basis ( $l=1$ )

Wir berücksichtigen zwei Level pro Atom

$$(E_{1k} - E_{21}) c_{11}^k = \underbrace{\left( \frac{ika - ika}{2 \cos ka} \right) t_{12,11} + \beta_{12,11}}_{\text{konstant}} c_{11}^k$$

$\Rightarrow E_{1k} = E_{21} + \beta_{12,11} + 2 t_{12,11} \cos ka$   
 $\Rightarrow$  Bandstruktur fertig!

Erlaubte Bereich für  $E_{1k}$



Lücke, verboten!

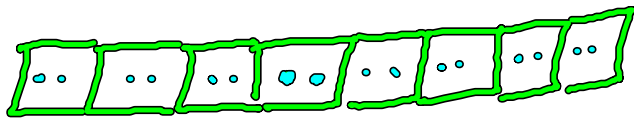
Für kleine  $k$  um das Minimum gilt  $\overset{\text{d.h.}}{\approx}$  typische Banddispersion:

$$E_{1k} = \underbrace{E_{21} + \beta_{12,11} + 2 t_{12,11}}_{\text{konstant}} + \underbrace{t_{12,11} a^2 k^2}_{\text{Parabolisches Band}}$$

$\parallel \epsilon_1(k) = E_1(k) = \underline{E} + t_{12,11} a^2 k^2 \parallel$  Dispersionsebene in 1D Fall.

Ähnliche Dispersionsverläufe wie das freie Elektronen. Elektronen scheint sich ähnlich zu bewegen, aber mit modifizierter Masse.

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



$\Rightarrow$  führt zur 2x2 Matrix  
und zwei Bändern

$$(E_1(k) - E_{12}) c_{12}^k = \left( \sum_{l=1,2} e^{ik \cdot (R_{12} - R_{1l})} t_{12}^{kl} + \beta_{12} e^{ik \cdot R_{12}} \right) c_{1l}$$



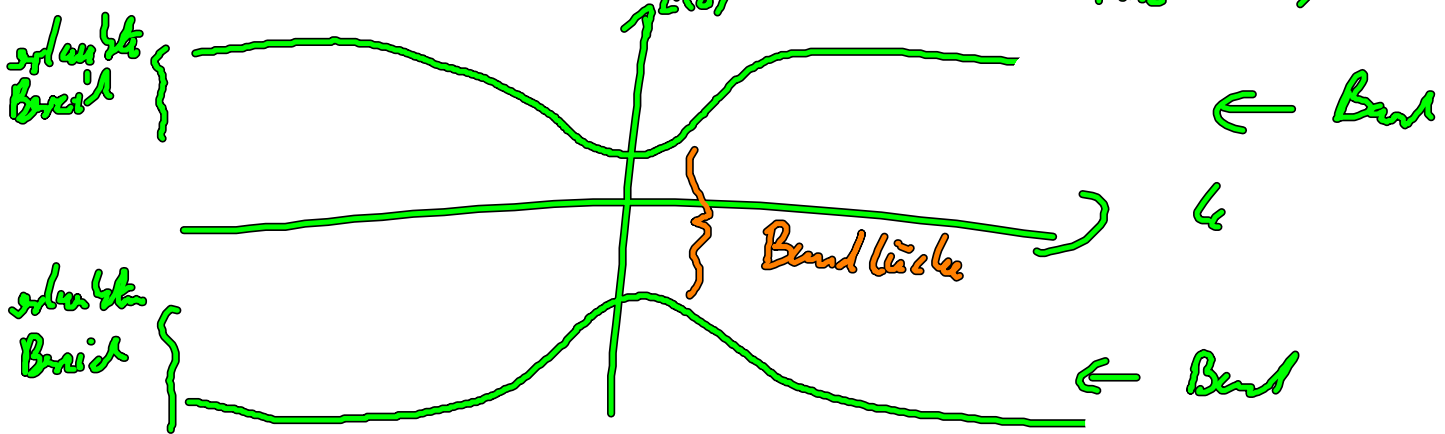
$$e^{ika} t_{12} + e^{-ika} t_{21} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{muss symmetrisch sein}}$$

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

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

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

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



Die Kopplung der nearesten Basis führt zu einer Aufspaltung.

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

Bänder können durch Besatz in dem kein Zustand getrennt sein! (Bandlücken)

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

Bemerkung:

$\tilde{u}$  basiert in der weiteren Methode

(1) Methode die nach Elektronen korrektur entwickelt (Mean Field unterster Approximationsstufe: Hartree Fock (singlet), ... , doublets, coupled doublets  $\Rightarrow$  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 des Atoms in Kern- und Valenzelektronen aufteilen, Einfluss des Kerns mit effektivem Pseudopotential auf die Valenzelektronen.

(4)  $k \cdot p$  Methoden

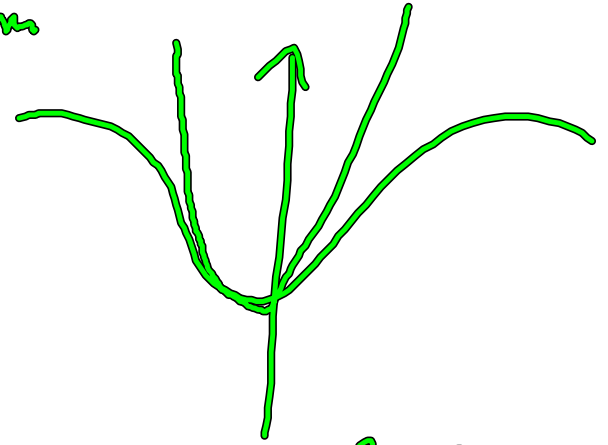
# III.5 Effektive Massennäherung und Geschwindigkeit der Elektronen

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

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

ähnlich der eines freien Teilchens mit

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



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

Man konstruiert den effektiven Massentensor:

! da Banddispersion um ein klein Störwert weichen:

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

Zurück zur Bestimmungsgl. von  $u_k(k)$

$$\underbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla + ik)^2 + V_0(k) \right]}_{H_k} u_k(k) = E_j(k) u_k(k)$$

Dann ist

$$H_{k+q} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla + ik + iq)^2 + V_0(k+q)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla + ik)^2 - \frac{\hbar^2}{m_e} (\nabla + ik) \cdot iq + \frac{\hbar^2}{2m_e} q^2 + V_0(k+q)$$

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

$\Rightarrow$  Störungstheorie

$$H_0 \psi_k = E_1(k) \psi_k$$

$$(b) \quad E_1(k+\xi) = E_1(k) + \sum_j \int dx \psi_{k_j}^*(x) \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{1}{i} \nabla + k \right) \cdot \xi \cdot \psi_{k_j}(x) \\ + \sum_{j \neq k} \frac{|\int dx \psi_{k_j}^*(x) \left( \frac{1}{i} \nabla + k \right) \cdot \xi \cdot \psi_k(x)|^2}{(E_1(k) - E_{j,1}(k))} \\ + \underbrace{\int dx \psi_k^*(x) \frac{\hbar^2}{2m} \xi^2 \psi_k(x)}_{\frac{\hbar^2}{2m} \xi^2} + O(\xi^3)$$

Wir suchen alle Terme auf, die linear in  $\xi$  sind:

$$\frac{\partial E_1(k)}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{m} \int dx \psi_k^*(x) \left( \frac{1}{i} \nabla + k \right) \psi_k(x)$$

Auf die rechte Seite übertragen:

$$|| \frac{\partial E_1(k)}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \psi_k^*(x) \left( \frac{1}{i} \nabla \right) \psi_k(x) ||$$

Interpretation: Durchschnittsgeschwindigkeit,  $\psi$

Geschwindigkeit,  $\psi$  Operate!

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

Also die Ableitung der Banddispersionskurve besteht aus der Durchschnittsgeschwindigkeit!

Jetzt können wir nach den Termen in der 2. Ordnung forschen: 2

$$\sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_1(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{l \neq 1} \frac{|\int dx \psi_{1l}^*(k) \frac{\hbar^2}{2m} q \cdot (\nabla) \psi_{1l}(k)|^2}{E_1(k) - E_{1l}(k)}$$

↓ auf Blochfunktion umschreiben

$$\sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_1(k)}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{l \neq 1} \frac{|\int dx \psi_{1l}^*(k) \frac{\hbar^2}{2m} q \cdot (\nabla) \psi_{1l}(k)|^2}{E_1(k) - E_{1l}(k)}$$

$$P_{11'l} = \left( \int dx \psi_{1l}^*(k) \frac{\hbar^2}{2m} q \cdot (\nabla) \psi_{1l}(k) \right)^2$$

Damit ist der effektive Massentensor

$$\left( \frac{1}{m_{\text{eff}}} \right)_{ij} = \frac{\partial^2 E_1(k)}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\hbar^2}{m} \delta_{ij} + \sum_{l \neq 1} \frac{P_{11'l} (\delta_{ij} + (P_{11'l})_i (P_{11'l})_j + (P_{11'l})_j (P_{11'l})_i)}{E_1(k) - E_{1l}(k)}$$

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

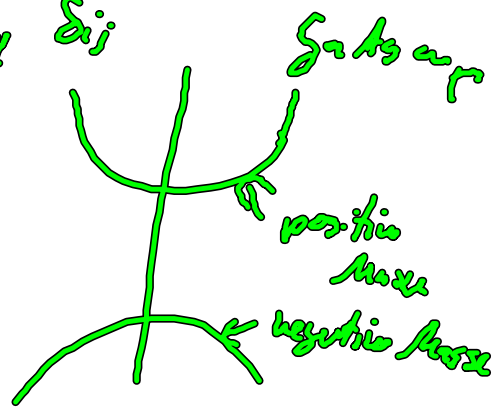
(Im Extremum in der Bandstruktur im Bravais)

Dann gilt:

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

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

$E_1(k_0 + k) = E_1(k_0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{eff}}}$   
 Effektive Masse kann negativ oder positiv sein!



Bandstruktur ist das Band voll besetzt kann bei negativen Massen, ein fehlendes Elektron auch als Loch mit umgekehrter Energiezuteilung, einfach mit Ladung und angeregt werden

### III.6 Nanostrukturen (Beispiele)

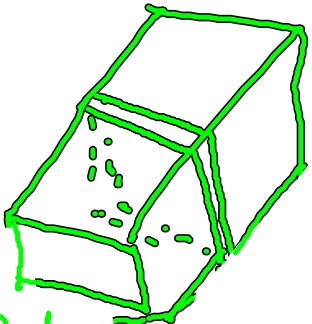
Wir haben gesehen, dass sich Elektronen in Kristallen wie ein modifiziertes Elektron verhalten.

Idee: Resonanz äquivalent Strukturen bauen und sie durch die Elektronen einsparen! So dass sich stattdessen Mehr bilden!  
 => Strukturen größer und Elektronen werden länger!

#### Grundtypen

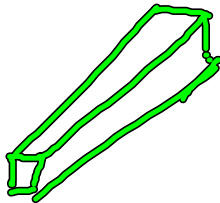
Halbleiter in 1D eingeschränkt

Querschnitt



Realisierung  
 z.B. zwei Halbleiter mit unterschiedlicher Bandbreite

Quadratkristall in 2 Dimension eingeschränkt



Quadratkristall



in 3 Dimension eingeschränkt.