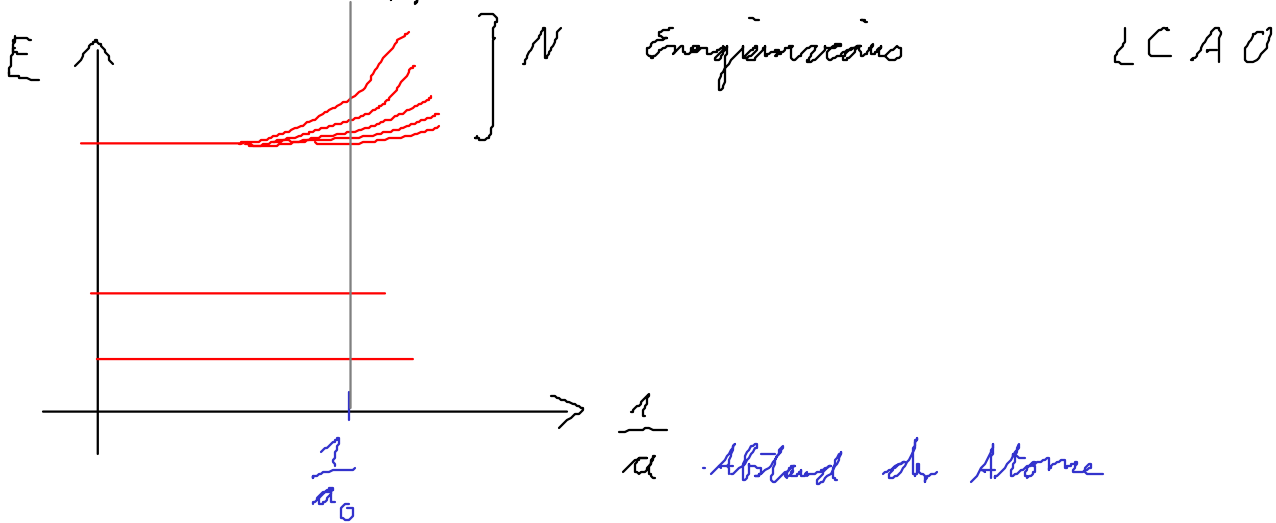


repetition

electron in periodic potential

Tight - Binding - Modell - stark gebundene Elektronen

Idee: Überlapp der Wellenfunktionen (Valenzelektronen)



Für isoliertes Atom $H\varphi = E\varphi$

$$H = H_A + H_S$$

isoliertes Atom Störung

$$H_A = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{V}_A(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

Störvektor

$$H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) = \sum_{m \neq m'} \tilde{V}_A(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$E_{\vec{k}} = \frac{\int \psi_{\vec{k}}^* H \psi_{\vec{k}} dV}{\int \psi_{\vec{k}}^* \psi_{\vec{k}} dV}$$

Lösungsansatz

$$\psi_{\vec{k}} \approx \sum_m \alpha_m \varphi(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

Lösung für isoliertes Atom

wir setzen $\alpha_m = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m}$

keine orthonormierte Basis

orthonormal-Basis für lokalisierte Zustände sind

Wannier-Funktionen

$$W_m(\vec{r} - \vec{R}_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Block-Wellenfkt.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}_m} \psi_m(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$E_{\vec{k}} \approx \frac{1}{\langle \psi_{\vec{k}} | \psi_{\vec{k}} \rangle} \frac{1}{N} \sum_{m, m'} e^{i \vec{k} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_{m'})} \int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}_m) \left[H_A + H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) \right] \psi(\vec{r} - \vec{R}_{m'}) dV$$

≈ 1

Energieänderung durch Nachbar-Potential

$$\alpha = - \int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}_m) H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) \psi(\vec{r} - \vec{R}_m) dV$$

Energieänd. durch Überlapp der Wellenfunktionen

$$\beta = - \int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}_m) H_S(\vec{r} - \vec{R}_{m'}) \psi(\vec{r} - \vec{R}_{m'}) dV$$

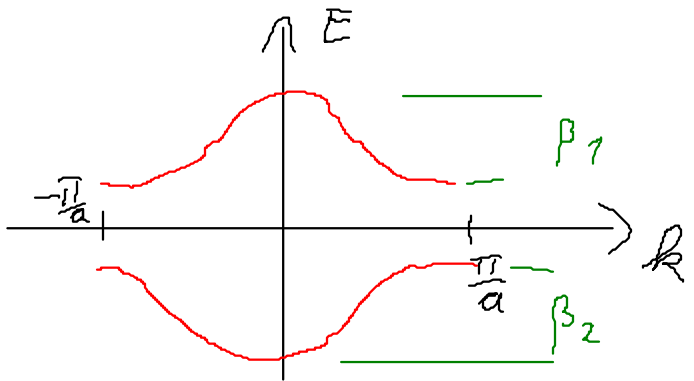
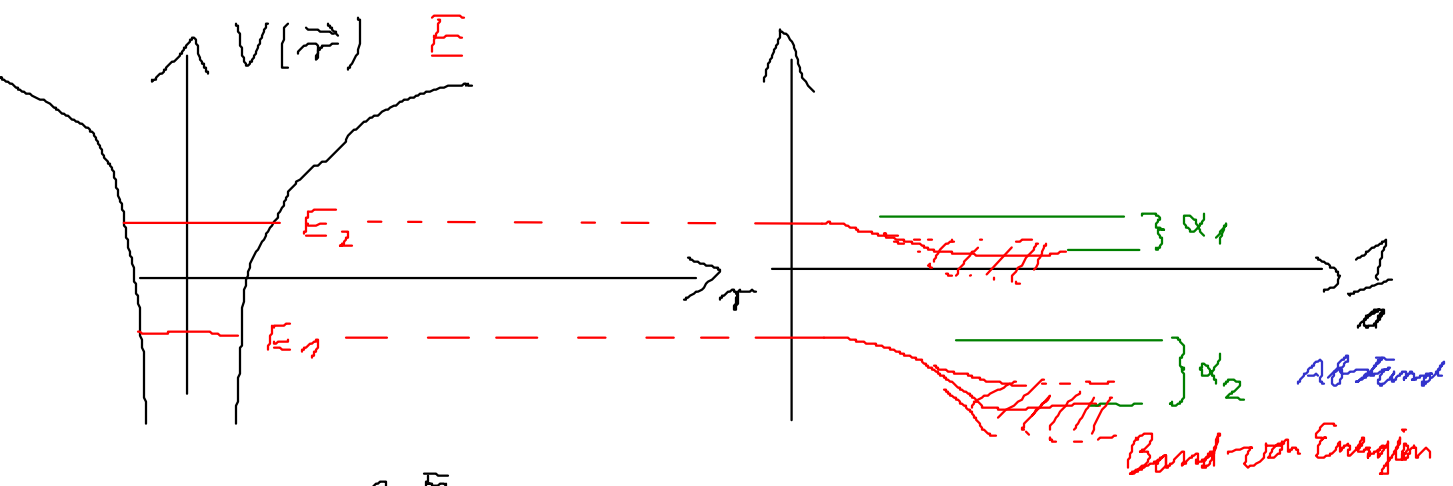
$$E_{\vec{k}} = E_i - \alpha_i - \sum_m \beta_{i,m} e^{i \vec{k} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_m)}$$

$$\approx E_i - \alpha_i - 2 \beta_i (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$$

nur nächste Nachbarn in 3D-Lattice

$$\approx E_i - \alpha_i - 2 \beta_i (3 + a^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)) = E_i - \alpha_i - 6 \beta_i (1 + a^2 k^2)$$

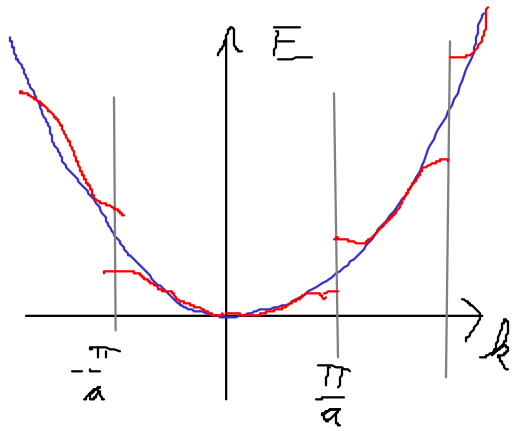
schwaches Potential



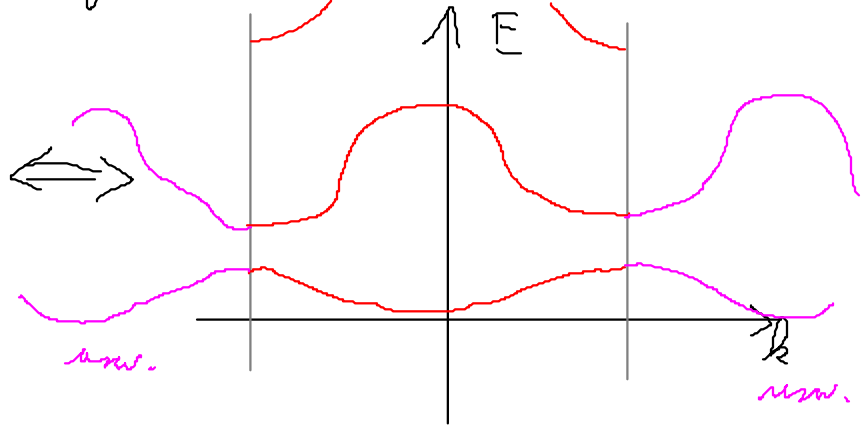
Parabel => effektive Masse

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2 \beta a^2}$$

im oberen Band negative Masse \Rightarrow Loch



erweitertes Zonenschema



reduziertes Zonenschema

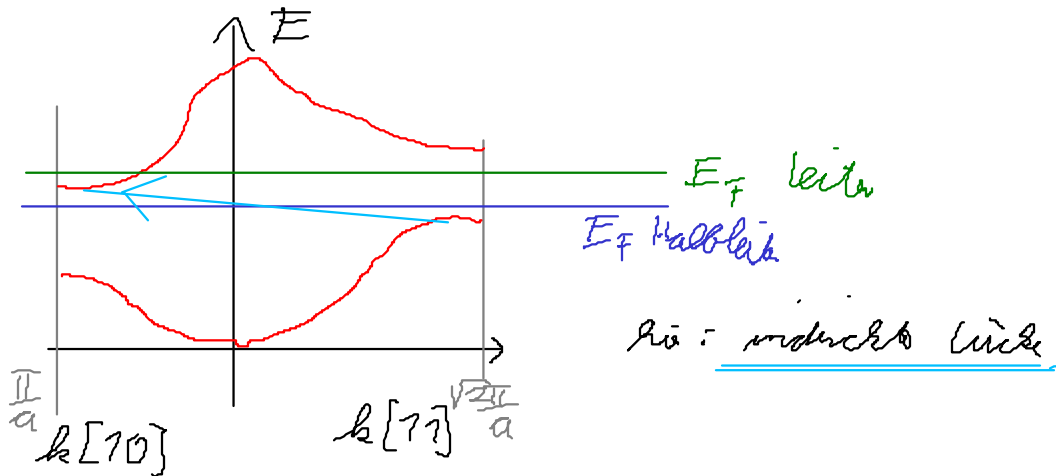
(siehe Folie)

periodisches Zonenschema

Wie zeichnet man die Kurven für 2D oder 3D-Kristalle?

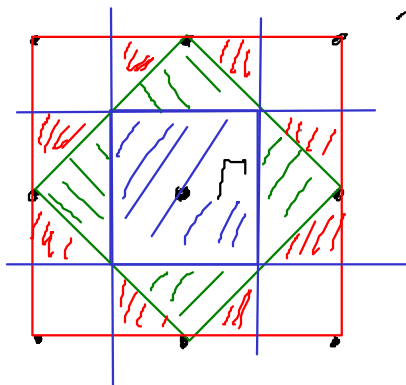
\rightarrow verschiedenen Richtungen

Bsp
2D-Kristall



Brillouin - Zonen und Fermi - Flächen

2D



rez. Gitter

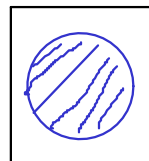
(Folie)

1. BZ

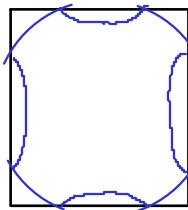
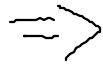
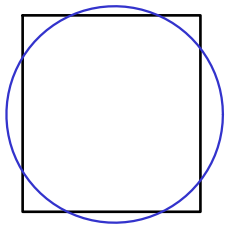
2. BZ

3. BZ

Bsp. Fermi - Energie in 1. BZ



Fermi-Energie passt nicht mehr in 1. BZ

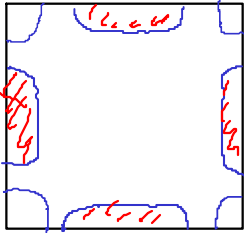


← hier wird die Fermi-Kugel verbogen, da die

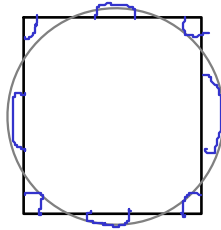
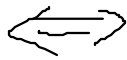
Gruppeneschwindigkeit $v_{gr} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = 0$ sein



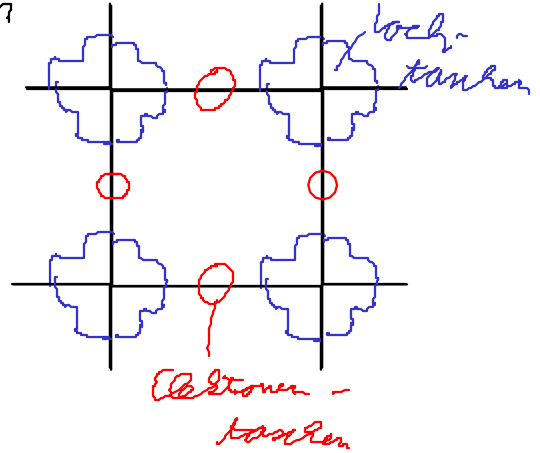
↔ stehende Wellen



reduziertes Zonenschema



erweitertes Zonenschema



www.phys.uci.edu/~fermisurface/