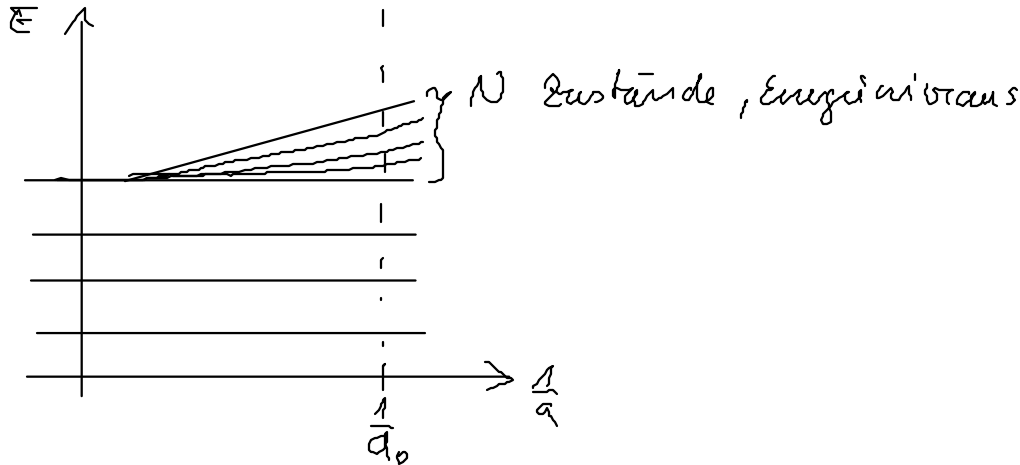


# Hybrid-Binding-Model: Stark gebundene Elektronen (TBM) (LCAO)

Idee: Überlapp der Wellenfunktion (Valenzelektronen)

- LCAO: linear combination of atomic orbitals
- ⇒ Grundlage der Quantenchemie



Wellenfkt  $\psi$  für ein isoliertes Atom

$$\mathcal{H}\psi = E\psi \quad \mathcal{H} = H_A + H_S$$

Atome mit Index  $m$   $u \neq m$

$$H_A = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_A(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

Gittervektor

$$H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) = \sum_{n \neq m} V_A(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Energieeigenwerte

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

Lösungsansatz

$$\psi_{\vec{k}} \approx \sum_m a_m \cdot \psi(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

setze  $a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp[i\vec{k} \cdot \vec{R}_m]$  (nicht orthonormiert)

- Orthonormal-Basis lokalisierter Zustände sind Wannier-Funktionen  $\rightarrow$  transformiert Blochfunktionen

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

$$\text{Blochfunktionen } \psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} \exp[i\vec{k} \cdot \vec{R}_m] W_m(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$E_{\vec{k}} \approx \frac{1}{\int \psi_{\vec{k}}^* \psi_{\vec{k}} dV} \frac{1}{N} \sum_{m,n} \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_n)] \int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}_n) (H_A + H_S(\vec{r} - \vec{R}_m)) \psi(\vec{r} - \vec{R}_m) dV$$

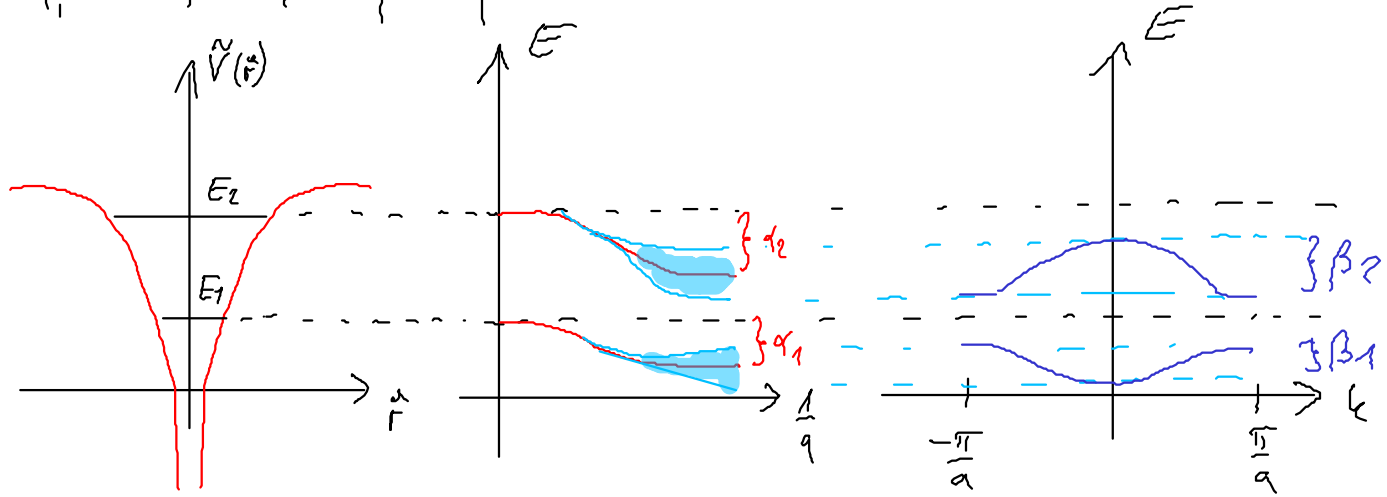
$\underbrace{\int \psi_{\vec{k}}^* \psi_{\vec{k}} dV}_{\approx 1}$

- Energieänderung durch Nachbar-Potential  $\alpha = - \int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}_m) H_S(\vec{r} - \vec{R}_n) \psi(\vec{r} - \vec{R}_m) dV$
- - " - durch Überlapp der Wellenfkt  $\beta = - \int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}_n) H_S(\vec{r} - \vec{R}_m) \psi(\vec{r} - \vec{R}_m) dV$

$$\tilde{E}_{k_i} = E_i - \alpha_i - \sum_n \beta_n \exp[ik^x (\tilde{R}_n - \tilde{R}_0)] \approx E_i - \alpha_i - 2\beta_i (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

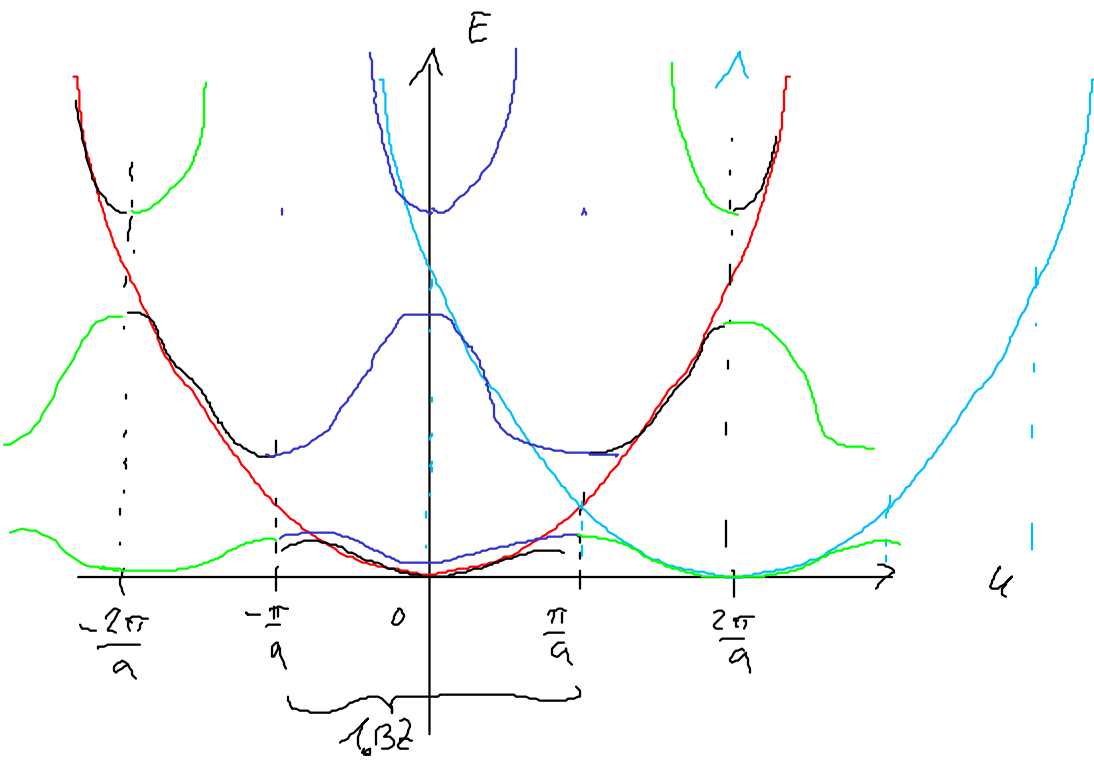
Lambert'sche Formel gilt

$$E_{k_i} \approx E_i - \alpha_i - 6\beta_i + \beta_i a^2 k^2$$



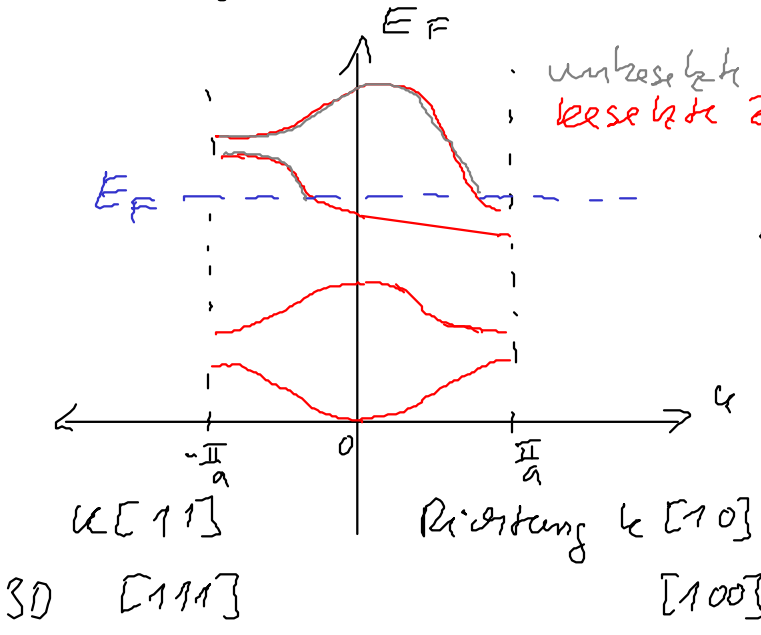
• effektive Masse  $m_i^* = \frac{\hbar^2}{2\beta_i a_i^2}$

## Energie dispersions Kurven



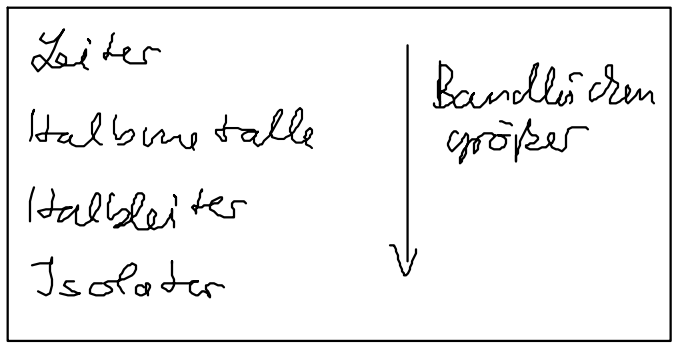
erweitertes Zonenschema  
 reduziertes Zonenschema  
 periodisches Zonenschema

# 2d. Leiter



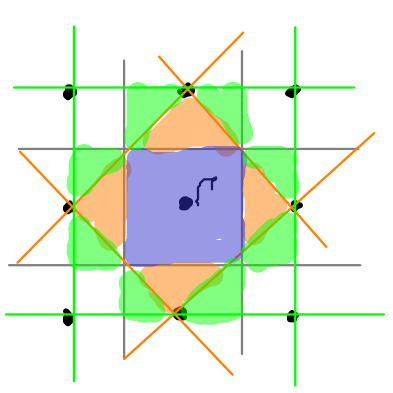
unbesetzte Zustände bei  $T=0$   
 besetzte Zustände

direkt  
 indirekt } Energieklappe

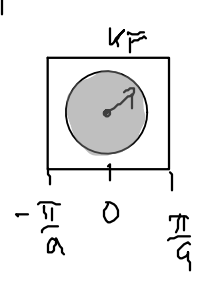


## Brillouin-Zonen und Fermi-Flächen

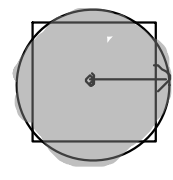
2D Ursprung im rezip. Raum  $\Gamma$



1.BZ  
 2.BZ  
 3.BZ



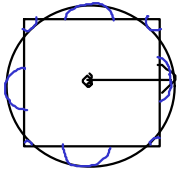
1. BZ  
 $k_{F1} = (3\pi^2 n_F)^{\frac{1}{3}}$



$k_{F2} > k_{F1}$

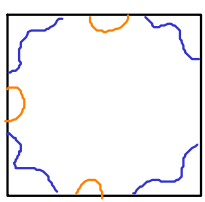
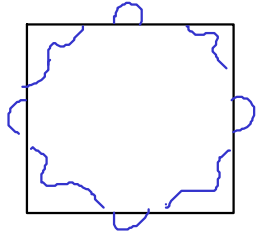
• an der Zonen-grenze (stehende Wellen)  $\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E = 0$

Wider\_spruch: Bild  $\Leftrightarrow$  Gruppengeschwindigkeit



$\rightarrow$  veränderte Kugel

(www.phys.ufl.edu/ferrisurf/face/)



erweitertes

reduziertes

