

10. Tight Binding Chain (stark gebundene Elektronen)

- kleiner Ausflus zu Metallen / Elektronen
- um zu zeigen, daß sich alle Arten von Wellen ähnlich verhalten in einer periodischen Umgebung
- zuvor Vibrationswellen, jetzt Elektronenwellen (Dualität Teilchen $\leftrightarrow$ Welle)

10.1 Tight Binding Modell in 1D

- Linear combination of atomic orbitals, siehe Kap. 6.2.2

$$\dots \textcircled{\bullet} \quad \textcircled{\bullet} \quad \textcircled{\bullet} \quad \textcircled{\bullet} \dots$$
$$|n-1\rangle \quad |n\rangle \quad |n+1\rangle \quad |n+2\rangle$$

- ein Orbital pro Atom $|n\rangle$
- Elektronen können von Atom zu Atom hüpfen
- 1D FK
- periodische Randbedingung
- Orbitale sind orthogonal $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ (10.1)
(keine gute Näherung, vor allem wenn die Atome nahe zueinander sind; macht aber alles viel einfacher, ohne die wichtige Physik zu vergessen)
- Ansatz: Wellenfkt.

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle \quad \phi_n \in \mathbb{C}$$

- effektive Schrödingergl. (variationelle Näherung) mit Atomorbitale

$$\sum_m H_{nm} \phi_m = E \phi_n \quad (10.2)$$

mit Matrixelement

$$H_{nm} = \langle n|H|m\rangle$$

- dies ist eine variationelle Näherung, da Atomorbitale benutzt werden

- Nahrung kann verbessert werden wenn mehrere AO benutzt werden
- Orthogonalitatsannahme nicht benutzen

• Hamiltonian

$$H = K + \sum_j V_j$$

kinetische Energie $K = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

Coulomb WW $V_j = V(\vec{r} - \vec{R}_j)$

$\vec{R}_j$: Position von Kern j

$\vec{r}$: Position von e^-

Einatom losung:

$$(K + V_m) |m\rangle = \epsilon_{\text{atom}} |m\rangle$$

$$\Rightarrow H_{nm} = \langle n | H | m \rangle \stackrel{(10.1)}{=} \epsilon_{\text{atom}} \delta_{n,m} + \sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle$$

$$\sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle = \begin{cases} V_0 & n=m \\ -t & n=m \pm 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \begin{matrix} \leftarrow V_{\text{cross in 6.2.2}} \\ (10.3) \end{matrix}$$

$$H_{nm} = \epsilon_0 \delta_{nm} - t (\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}) \quad \begin{matrix} \text{Hopf-Term} \\ (10.4) \end{matrix}$$

mit $\epsilon_0 = \epsilon_{\text{atom}} + V_0$

• ein sehr studiertes Modell

• t = hopping term (hopf-Term): e^- kann von Atom zu Atom hopfen

10.2 Losung der tight binding Kette

• Losung sehr ahlich zum Vibrationsproblem 1) Kette

• Ansatz $\phi_n = \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} \quad (10.5)$

- wir haben kein $e^{i\omega t}$, da wir nicht die zeitabhangige Schrodingergl. haben

- k und $k + \frac{2\pi}{a}$ gibt die selbe Lösung $\Rightarrow$ BZ $|k| \leq \frac{\pi}{a}$

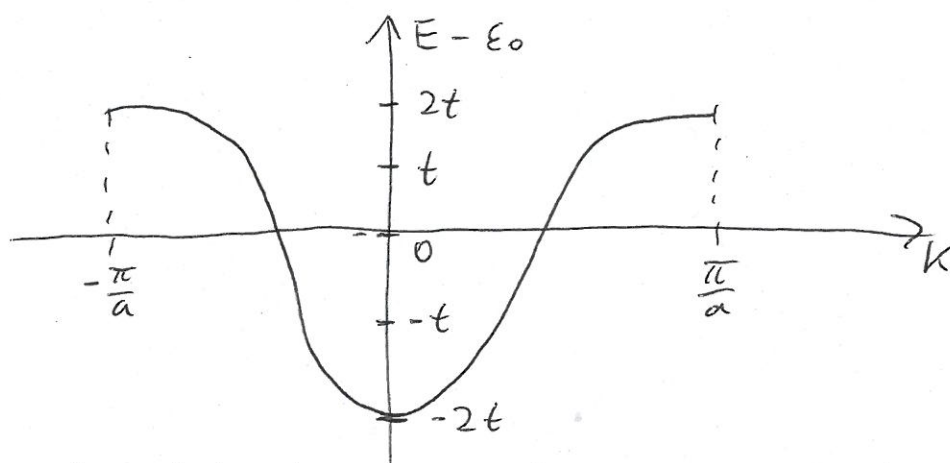
- N Atome $\Rightarrow$ Länge $L = Na \Rightarrow$ quantisierte k -Werte
 $k = n \frac{2\pi}{L} \quad n \in \mathbb{Z}$

(10.5) in (10.2) mit (10.4)

$$\sum_m H_{nm} \phi_m = \epsilon_0 \frac{e^{ikna}}{\sqrt{N}} - t \left(\frac{e^{-ik(n+1)a}}{\sqrt{N}} + \frac{e^{ik(n-1)a}}{\sqrt{N}} \right)$$
$$= E \phi_n = E \frac{e^{ikna}}{\sqrt{N}}$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \epsilon_0 - 2t \cos(ka)} \quad (10.6)$$

• ähnlich zum Phononenspektrum der 1D Kette
(Eq. 9.2) $\omega^2 = 2 \frac{\kappa}{m} - 2 \frac{\kappa}{m} \cos(ka)$



- Dispersion ist $k \rightarrow k + \frac{2\pi}{a}$ periodisch

- Gruppengeschwindigkeit ist Null am BZ-Rand $|k| = \frac{\pi}{a}$

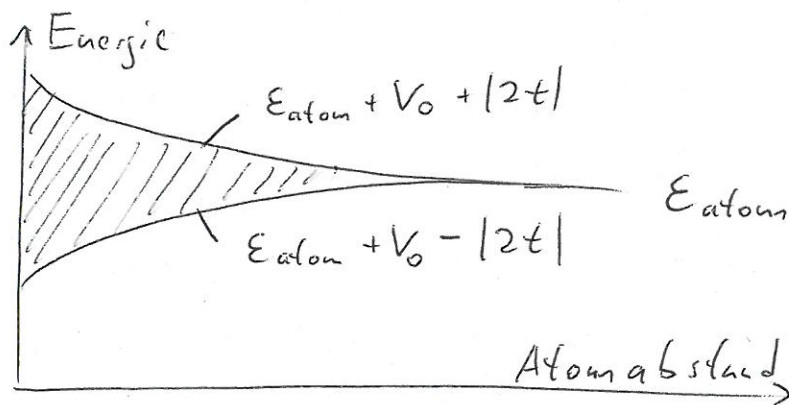
$$\frac{dE}{dk} = 0 \quad \text{bei } |k| = \frac{\pi}{a}$$

- im Gegensatz zum freien Elektronenmodell hat das e^- eine maximale und minimale Energie
 $\Rightarrow$ die Energie der e^- sind auf ein "Energieband" beschränkt mit Bandbreite $= 4t$

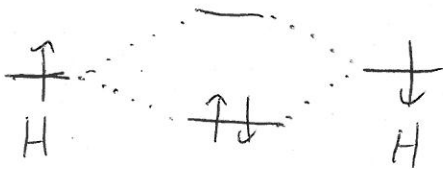
- für "höhere / tiefere" Energien gibt es keine k -Werte

- die Bandbreite $4t$ hängt vom Atomabstand ab

- exponentielle Abfall für große Abstände



- ganz rechts: kein hopping
 - Energiezustände möglich im ausgefüllten Bereich
 - mittlere Energie ist $E_0 = E_{\text{atom}} + V_0$
 - wenn hopping erlaubt, ein Teil der Eigenzustände geht tiefer in Energie, andere steigen
- $\Rightarrow$ analog zu bonding und anti-bonding Orbitals (sec. 6.2.2)



- unten im Band ist die Dispersion parabolisch mit Eq. 10.6 und $|k| \ll \frac{\pi}{a}$

$$\Rightarrow E(k) = \text{Constant} + t a^2 k^2$$

$\Rightarrow$ ähnlich zum freien Elektronenmodell

$$E_{\text{free}}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

aber eine andere effektive Masse m^*

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = t a^2 k^2 \Rightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$$

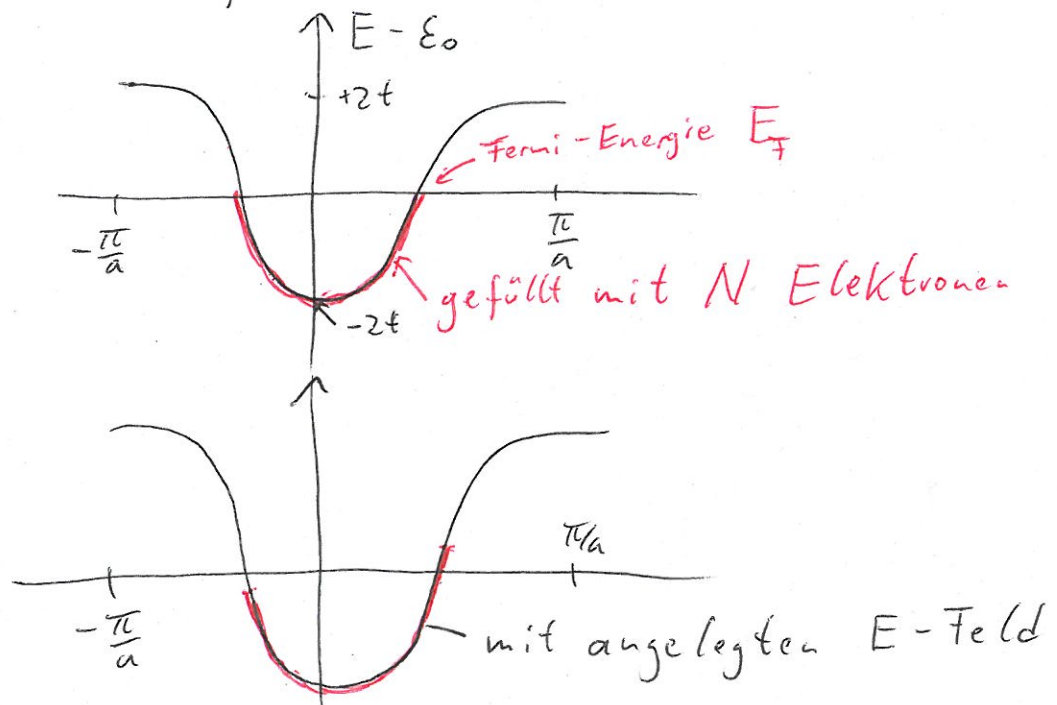
d.h. die effektive Masse ist so definiert, daß die Dispersion unten im Band gleich der Dispersion der freien Elektronen ist $\Rightarrow$ mehr später!

- $m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$ hat nichts mit der Elektronenmasse zu tun; sie hängt vom hopping-tern ab

• k ist der Kristallimpuls $k_{\text{Kristall}} = k \bmod \frac{2\pi}{a}$
(wichtig wenn man Streuung betrachtet)

10.3 Elektronenfüllung von Bändern

- Kette von Atomen mit je einem Valenz-Elektron
- wir haben N k -Werte
- da e^- Fermionen sind, können sie jeden k -Wert mit zwei e^- füllen

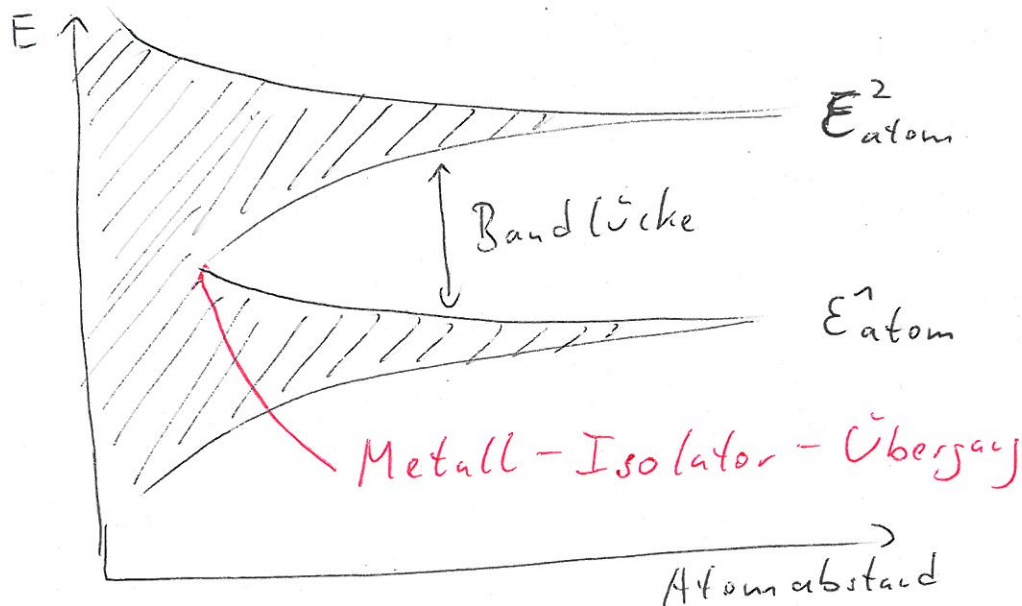


- Wenn elektrisches Feld angelegt wird, k -Wert erhöhen sich $\Rightarrow$ Leitfähigkeit $\Rightarrow$ Metall
- Kette mit di-Valenz (zwei e^- pro Atom)
 $\Rightarrow$ das ganze Band ist voll, da alle k -Werte besetzt sind $\Rightarrow$ Band-Isolator

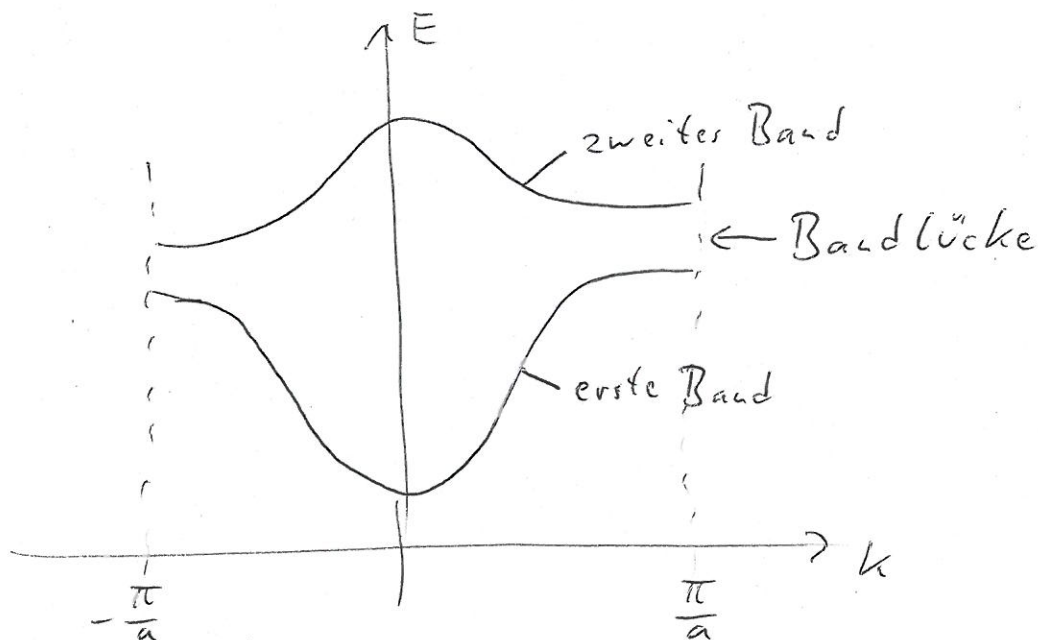
Prinzip: Ein volles Band kann kein Strom tragen
(in 1D) korrekt, aber in 3D gibt es
Hall-Effekte auch von diesen Bändern
 $\Rightarrow$ Chern-Bänder, heißes Forschungsthema)

10.4. Mehrere Bänder

- ein Atom pro Einheitszelle mit zwei Orbitalen



- zwei verschiedene Atome mit je ein Orbital



$\Rightarrow$ analog zur Vibration von biatomischen Kette