

Theorie der Kondensierten Materie I

Notiztitel

27.01.2011

Bisher: Konstruktion von „Bloch-Funktionen“ (als Ansatz für Lösungen der SG) aus atomaren Wellenfunktionen $\psi_n(\vec{r})$. **Problem:** Die atomaren WF zu verschiedenen Gitterplätzen sind nicht orthogonal aufeinander (direkter Überlapp) \leadsto keine Orthonormalbasis.

Geht man umgekehrt von den echten Bloch-Funktionen $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ als Lösungen der SG aus, kann man eine orthonormale Basis aus lokalisierten Zuständen konstruieren, die **Wannier-Funktionen** $w_n(\vec{r}-\vec{R})$:

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

Diese sind tatsächlich orthonormal ($\vec{k}, \vec{k}' \in 1. \text{BZ}$):

$$\int d^3r w_n^*(\vec{r}-\vec{R}_1) w_e(\vec{r}-\vec{R}_2) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{R}_1 - \vec{k}'\cdot\vec{R}_2)}$$

$$\int d^3r \psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{e\vec{k}'}(\vec{r})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)} \int_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{ne'} = \delta_{\vec{R}_1, \vec{R}_2} \delta_{ne'}$$

Umgekehrt lassen sich Bloch-Funktionen als Linear-

Kombination von Wannier-Funktionen darstellen:

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

Analog zum obigen TB-Ansatz erhalten wir (mit $\alpha=0$) die Dispersionsrelationen:

$$\epsilon_n(\vec{k}) = \tilde{E}_n + \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \tilde{\lambda}_n(\vec{R})$$

$$\text{mit } \tilde{E}_n = \int d^3r w_n^*(\vec{r}) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{R}} v(\vec{r}-\vec{R}) \right) w_n(\vec{r})$$

$$\text{und } \tilde{\lambda}_n(\vec{R}) = \int d^3r w_n^*(\vec{r}-\vec{R}) v(\vec{r}-\vec{R}) w_n(\vec{r})$$

Konsistent mit der Vernachlässigung von Dreizentren-Beiträgen wird erwartet, dass die $\tilde{\lambda}_n(\vec{R})$ für große $|\vec{R}|$ schnell abfallen. Einfachste und oft benutzte TB-Annahme:

$$\tilde{\lambda}_n(\vec{R}) = \begin{cases} -t & \text{für } \vec{R} \text{ nächster-Nachbar-Vektor} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (*)$$

Den Parameter t nennt man auch **Hüpf-Matrix-Element** („hopping“): es entspricht der Amplitude dafür, dass ein Elektron von einem Gitterplatz

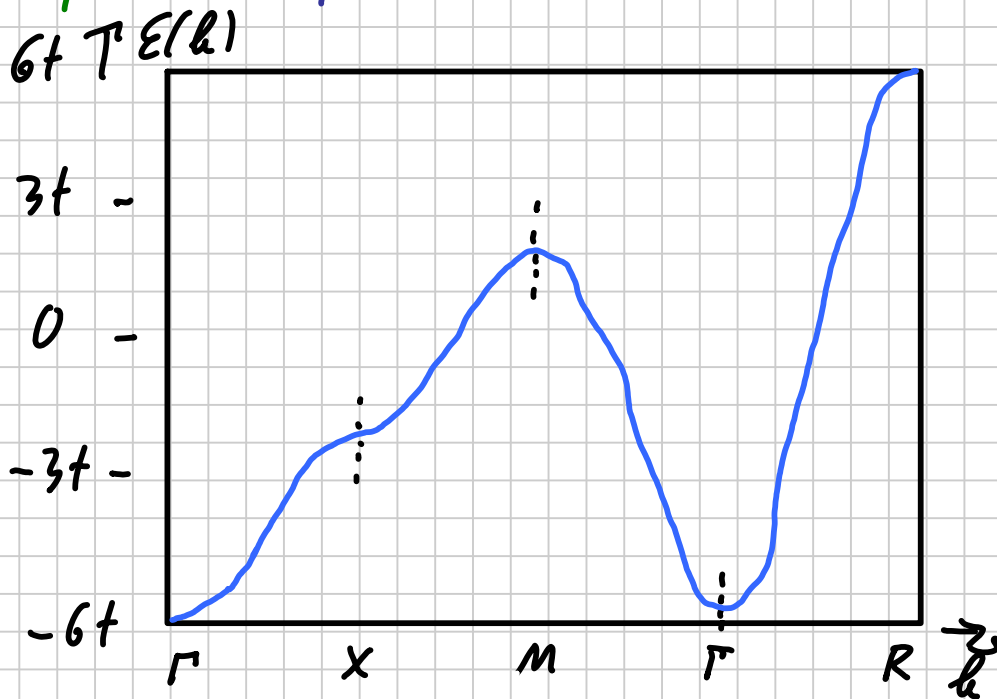
zum anderen (hier zum nächsten Nachbarn) übergeht.

Die Annahme eines isotropen $\vec{t}(\vec{R})$ (gleiches t in alle Raumrichtungen) entspricht s-artigen (räumlich isotropen) Wannier-Funktionen.

Für ein hyperkubisches Gitter erhält man aus *:

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 - 2t \sum_{\alpha=1}^d \cos(k_{\alpha} a)$$

Beispiel: einfach kubisches Gitter



Eine Entwicklung um den Gamma-Punkt liefert:

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 - 2dt + ta^2|\vec{k}|^2 + \mathcal{O}(k^4)$$

und somit eine effektive Masse $m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2t}$, die

(97) für $t \rightarrow 0$ divergiert.