

Theorie der Kondensierten Materie I

Notiztitel

01.02.2011

Problem: Um die Wannier-Funktionen und damit die Hüpfamplituden *ab initio* zu berechnen, müsste man die Bloch-Zustände kennen und damit das 1-Teilchen-Problem im vorgegebenen Potential $V(\vec{r})$ schon gelöst haben.

1. Ausweg: Betrachte lokale Energien \tilde{E}_n und Hüpfamplituden $t_{\vec{R}\vec{R}'}$ als **Parameter** im Modell-Hamilton-

Operator
$$H = \sum_{n\vec{R}} \tilde{E}_n |n\vec{R}\rangle \langle n\vec{R}| + \sum_{n,\vec{R},\vec{R}'} t_{\vec{R}\vec{R}'}^{(n)} |n\vec{R}\rangle \langle n\vec{R}'|$$

z.B. mit
$$t_{\vec{R}\vec{R}'}^{(n)} = \begin{cases} -t_n & \text{für } \vec{R}, \vec{R}' \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Hierbei ist in Ortsdarstellung $w_n(\vec{r}-\vec{R}) = \langle \vec{r} | n\vec{R} \rangle$. Die Parameter können (für die unteren Bänder) ggf. an experimentelle Daten gefittet werden (unter Berücksichtigung der vorgegebenen Gitterstruktur).

2. Ausweg: Approximation der Wannier-Funktionen

(i) nutze atomare Wellenfunktionen: $w_n(\vec{r}-\vec{R}) = \varphi_n(\vec{r}-\vec{R})$

Dann entspricht der Bandindex den atomaren Quantenzahlen, aber: keine Orthonormierung (s.o.)

(ii) LCAO-Methode: „linear combination of atomic orbitals“:
$$\psi_n(\vec{r}-\vec{R}) = \sum_{n \in U} a_n \varphi_n(\vec{r}-\vec{R})$$

(iii) Numerische Bandstruktur-Methoden:

a) Zellenmethode

b) Entwicklung nach ebenen Wellen

c) Augmented Plane Waves (APW), nutzt Muffin-Tin-Potential (konstant außerhalb von Kugeln)

d) Green-Funktions-Methode (KKR)

e) Orthogonalized Plane Waves (OPW)

f) Pseudopotential-Methoden: ersetzen singuläres Coulomb-Potential im Rumpf durch glatte, energieabhängige Pseudopotentiale.

Grundsätzliche Komplikationen:

- Potential singular für $\vec{r} \rightarrow \vec{R} \rightarrow$ starke Oszillationen der Wellenfunktionen (Wannier oder Bloch)
- komplizierte Symmetrie (nicht sphärisch)

Aber: große Bedeutung, da im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) anwendbar auch für wechselwirkende Systeme (mit e-e-WW).

Tight-Binding-Zustandsdichte für das hyperkubische Gitter

Aus der TB-Dispersion mit Hüpfern nur zwischen nächsten Nachbarn $\epsilon(\vec{k}) = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos(k_{\alpha} a)$ folgt

die Zustandsdichte pro Spinfreiheitsgrad $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$

$$\nu = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k} \in \Omega} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{1.BZ}} d^d k \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))$$

Zur expliziten Berechnung führen wir die Fourier-

Transformierte $\tilde{\nu}(\eta)$ der Zustandsdichte ein:

$$\tilde{\nu}(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \nu(\epsilon) e^{i\epsilon\eta}; \quad \nu(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \tilde{\nu}(\eta) e^{-i\epsilon\eta}$$

Diese kann nämlich auf eine wohlbekanntere spezielle

Funktion zurückgeführt werden:

$$\tilde{v}(\eta) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{1.BZ}} d^d k \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon(k)) e^{i\varepsilon\eta}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{1.BZ}} d^d k e^{i\eta\varepsilon(k)}$$

$$= \prod_{\alpha=1}^d \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_{\alpha} e^{-2i\eta \cos(k_{\alpha} a)} \right]$$

$$= \left[\frac{1}{2\pi a} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-2i\eta \cos(k)} \right]^d$$

$$\stackrel{\cos(-k) = \cos(k)}{=} \left[\frac{1}{\pi a} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-2i\eta \cos(k)} \right]^d$$

$$= \left[\frac{1}{a} J_0(-2\eta) \right]^d \stackrel{J_0(-x) = J_0(x)}{=} \left[\frac{1}{a} J_0(2\eta) \right]^d$$

mit der Bessel-Funktion 1. Gattung J_0 .

Durch inverse FT erhalten wir nun die Zustandsdichte:

$$v(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left[\frac{1}{a} J_0(2\eta) \right]^d e^{-i\varepsilon\eta}$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\eta \left[\frac{1}{a} J_0(2\eta) \right]^d \cos(\varepsilon\eta)$$

$$= \frac{1}{2\pi t} \int_0^{\infty} dx \left[\frac{1}{a} J_0(x) \right]^d \cos\left(\frac{\varepsilon}{2t} x\right)$$

Exkurs Besselfunktion: Die Besselsche DGL

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2) y = 0$$

ist eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung, die u.a. den radialen Anteil der Laplace-Gleichung bei zylindrischer Symmetrie darstellt. Sie hat stets 2 linear unabhängige Lösungen: (i) für n nicht-ganzzahlig sind dies J_n und J_{-n} , (ii) für n ganzzahlig tritt neben J_n auch die Bessel-Funktion 2. Gattung Y_n , die auch Weber-Funktion genannt wird.

Darstellung:
$$J_n(x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r \left(\frac{x}{2}\right)^{2r+n}}{\Gamma(n+r+1)r!}$$

$$Y_n(x) = \lim_{p \rightarrow n} \frac{J_p(x) \cos(p\pi) - J_{-p}(x)}{\sin(p\pi)}$$

□

Zustandsdichte der linearen Kette ($d=1$): hierfür lässt sich ein einfacher analytischer Ausdruck angeben:

$$\begin{aligned} \nu(\epsilon) &= \frac{1}{2\pi t a} \int_0^{\infty} dx J_0(x) \cos\left(\frac{\epsilon}{2t} x\right) \\ &= \frac{\Theta(2t - |\epsilon|)}{2\pi t a \sqrt{1 - (\epsilon/2t)^2}} = \frac{\Theta(2t - |\epsilon|)}{\pi a \sqrt{(2t)^2 - \epsilon^2}} \end{aligned}$$

mit Wurzel-Singularitäten an beiden Bandkanten.

Beachte auch: Symmetrie $\nu(-\epsilon) = \nu(\epsilon) \rightarrow$ perfect nesting!

Bevor wir explizit $d=2$ und $d=3$ ansprechen, wollen wir eine allgemeine Beziehung zwischen Zustandsdichten für den Fall separabler Dispersionen herleiten.

$$\text{Sei } \epsilon(\vec{k}) = \epsilon_{\parallel}(\vec{k}_{\parallel}) + \epsilon_{\perp}(k_{\perp})$$

$$\Rightarrow \nu(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))$$

$$= \frac{1}{L_{\perp}} \sum_{k_{\perp}} \frac{1}{V_{\parallel}} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \delta(\epsilon - \underbrace{\epsilon_{\perp}(k_{\perp})}_{=\epsilon} - \epsilon_{\parallel}(\vec{k}_{\parallel}))$$

$$= \frac{1}{L_{\perp}} \sum_{k_{\perp}} \nu_{\parallel}(\epsilon - \epsilon_{\perp}(k_{\perp}))$$

$$= \int d\epsilon_{\perp} \frac{1}{L_{\perp}} \sum_{k_{\perp}} \nu_{\parallel}(\epsilon - \epsilon_{\perp}) \delta(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\perp}(k_{\perp}))$$

$$= \int d\epsilon_{\perp} \nu_{\parallel}(\epsilon - \epsilon_{\perp}) \nu_{\perp}(\epsilon_{\perp})$$

Die Zustandsdichte in d Dimensionen ergibt sich also als **Faltung** einer $d-1$ -dimensionalen Zustandsdichte mit einer 1d-Zustandsdichte.

Für hyperkubisches Gitter: Iteration möglich!