

Student Project

Tight Binding Model

verfasst von

Peter WRIESNIK
Mat.Nr. 0630687

im Rahmen der Übungen **Molekül- und Festkörperphysik** an der
Technischen Universität Graz

und betreut von

Roland Resel
Institute of Solid State Physics
Graz University of Technology

Graz, August 2011

Inhaltsverzeichnis

1	Theoretische Grundlagen	3
1.1	Herleitung der Tight-Binding-Näherung	3
1.2	Anwendung der Näherung auf ein konkretes Potential	6
1.3	Numerische Auswertung	9

Kapitel 1

Theoretische Grundlagen

1.1 Herleitung der Tight-Binding-Näherung

Dem Tight-Binding-Modell zur Berechnung der Elektronenbandstruktur in Festkörpern liegt die Idee zugrunde dass bei einem periodischen Potential die Gesamtwellenfunktion als Linearkombination von atomaren Wellenfunktionen ϕ_A geschrieben werden. Es zeigt sich, dass es sinnvoll ist, diese Einzelwellenfunktionen als stark an ihre eigenen atomaren Potentiale V_A gebunden anzusehen, d.h dass sie wenig Wechselwirkung mit dem restlichen Kristallpotential zeigen, wodurch die Rechnung stark erleichtert wird. Die Gesamtwellenfunktion $\psi(k, x)$ muss die Eigenwertgleichung¹

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \right] \psi(k, x) = E(k)\psi(k, x) \quad (1.1)$$

erfüllen. $V(x)$ stellt hier das periodische Gitterpotential dar und kann geschrieben werden als

$$V(x) = \sum_{n=1}^N V_A(x - na) \quad (1.2)$$

wobei N die Anzahl der Potentiale und a den Abstand zwischen diesen

¹Die gesamte Berechnung erfolgt hier in der Ortsraumbasis, d.h. Impulsoperatoren sind durch Ableitungen und Ortsoperatoren durch die Ortsvektoren zu ersetzen. Außerdem wird die gesamte Berechnung zur Vereinfachung 1-dimensional durchgeführt. Sämtliche Überlegungen gelten jedoch in 3 Dimensionen analog.

darstellt. $\psi(k, x)$ wird nun als Linearkombination

$$\psi(k, x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} \phi_A(x - na) \quad (1.3)$$

angesetzt. Diese Funktionen erfüllen das Bloch-Theorem und sind somit als Lösungen von Glg. 1.1 zulässig. Die atomaren Wellenfunktionen $\phi_A(x)$ seien bekannt oder zumindest durch die atomaren Eigenwertgleichungen

$$H_A(n)\phi(x) = E\phi_A(x) \quad (1.4)$$

mit

$$H_A(n) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_A(x - na) \quad (1.5)$$

berechenbar. $H_A(n)$ beschreibt hier ein Teilchen, für welches das Potential V_A an der Stelle $x = na$ angegeben werden kann. Dieses wird in der hier durchgeführten Berechnung die Form eines endlich tiefen Potentialtopfs aufweisen.

Für die weitere Betrachtung wird das Potential mittels einer Hilfsttransformation

$$V(x) = V_A(x - na) + h_n(x) \quad (1.6)$$

$$h_n(x) = V(x) - V_A(x - na) \quad (1.7)$$

umgeschrieben. $h_n(x)$ bezeichnet die Differenz zwischen dem n-ten Atompotential und dem Gesamtpotential an der Stelle x . Somit kann der Gesamthamiltonoperator aus Glg. 1.1 geschrieben werden als

$$H = H_A(n) + h_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_A(x - na) + h_n \quad (1.8)$$

mit $H_A(n)$ als dem Hamiltonoperator für das n-te Einzelpotential. Einsetzen dieser Beziehung in Glg. 1.1 und Verwenden von 1.3 ergibt

$$\begin{aligned}
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_A(x-na) + h_n(x) \right] \cdot \sum_{n'} e^{ikn'a} \phi_A(x-n'a) = \\
= E(k) \sum_{n'} e^{ikn'a} \phi_A(x-n'a)
\end{aligned} \tag{1.9}$$

Hier kommt nun die grundlegende Idee hinter der Tight-Binding-Approximation zum Tragen: Die einzelnen atomaren Wellenfunktionen $\phi_A(x)$ sind stark an ihre jeweiligen Potentiale gebunden, d.h. sie fallen ausreichend schnell nach außen hin ab. Mathematisch bedeutet dies, dass in der Doppelsumme auf der linken Seite von Glg. 1.9 die Ausdrücke $V_A(x-na) \cdot \phi(x-n'a)$ und $h_n(x) \cdot \phi(x-n'a)$ für $n \neq n'$ verschwindet kleine Beiträge aufweisen, die vernachlässigt werden können. Dies entspricht einem Gleichsetzen von $n = n'$. Nach Subtraktion von $\sum_n E_A \cdot e^{ikna} \phi(x-na)$ erhält man

$$\begin{aligned}
\sum_n \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_A(x-na) - E_A \right] e^{ikna} \phi_A(x-na) = \\
- \sum_n e^{ikna} h_n(x) \phi_A(x-na) + [E(k) - E_A] \sum_n e^{ikna} \phi_A(x-na)
\end{aligned} \tag{1.10}$$

Die linke Seite in Glg. 1.10 verschwindet, da ja jede Wellenfunktion ϕ_A einen Eigenzustand des atomaren Hamiltonoperators darstellt. Somit bleibt

$$[E(k) - E_A] \sum_n e^{ikna} \phi_A(x-na) = \sum_n e^{ikna} h_n(x) \phi_A(x-na) \tag{1.11}$$

Multiplikation mit $\phi_A^*(x)$ und anschließende Integration ergibt

$$E(k) - E_A = \frac{\sum_n e^{ikna} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^*(x) \phi_A(x-na) h_n(x) dx}{\sum_n e^{ikna} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^*(x) \phi_A(x-na) dx} \tag{1.12}$$

Es ist hier sinnvoll, die Abkürzungen

$$h(n) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^*(x) \phi_A(x-na) h_n(x) dx \tag{1.13}$$

bzw.

$$I(n) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^*(x) \phi_A(x - na) dx \quad (1.14)$$

einführen. Somit lässt sich Glg. 1.12 als

$$E(k) - E_A = \frac{\sum_n e^{ikna} h(n)}{\sum_n e^{ikna} I(n)} \quad (1.15)$$

schreiben.

Obiger Ausdruck kann zwar exakt ausgewertet werden, dies ist jedoch nicht immer auf analytischem Wege möglich. Da bei der Tight-Binding-Approximation nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt werden, werden in den Summen nur Anteile mit $|n| \leq 1$ berücksichtigt. Falls die atomaren Wellenfunktionen reellwertig sind, was hier der Fall ist, gilt außerdem $h(1) = h(-1)$ sowie $I(1) = I(-1)$. Aus der Normierung folgt $I(0) = 1$. Somit ergibt sich

$$E(k) - E_A = \frac{h(0) + h(1) \cdot (e^{ika} + e^{-ika})}{1 + I(1) \cdot (e^{ika} + e^{-ika})} = \frac{h(0) + 2h(1)\cos(ka)}{1 + 2I(1)\cos(ka)} \quad (1.16)$$

1.2 Anwendung der Näherung auf ein konkretes Potential

Im Folgenden soll die konkrete Form von Glg. 1.16 für eine periodische Aneinanderreihung endlich tiefer Potentialtöpfe besprochen werden. In 1.16 treten lediglich die Ausdrücke $h_1(x)$ und $h_{-1}(x)$ auf. Diese sind nach 1.7

$$h_1(x) = V(x) - V_A(x - a) \quad (1.17)$$

bzw.

$$h_{-1} = V(x) - V_A(x + a) \quad (1.18)$$

V_A wird hier als ein endlich tiefer Potentialtopf der Breite $2b$ angeschrieben:

$$V_A = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |x| < b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.19)$$

Die Eigenfunktionen dieser Potentialtypen² haben die Form

$$\phi_A^+ = \alpha \cdot \begin{cases} \phi^a := \exp(\kappa_a x) & \text{für } -\infty < x \leq -b \\ \phi^b := \frac{\exp(-\kappa_a b)}{\cos(\kappa_a b)} \cdot \cos(k_a x) & -b < x < b \\ \phi^c := \exp(-\kappa_a x) & b \leq x < \infty \end{cases} \quad (1.20)$$

als symmetrische Lösung. In der weiteren Rechnung wird lediglich diese behandelt. Die antisymmetrische Lösung ergibt sich zu

$$\phi_A^- = \alpha \cdot \begin{cases} \exp(\kappa_a x) & \text{für } -\infty < x \leq -b \\ -\frac{\exp(-\kappa_a b)}{\sin(\kappa_a b)} \cdot \sin(k_a x) & -b < x < b \\ -\exp(-\kappa_a x) & b \leq x < \infty \end{cases} \quad (1.21)$$

α dient der Normierung. Im Folgenden wird es sinnvoll sein, diese stückweise definierten Eigenfunktionen mit ϕ^a , ϕ^b und ϕ^c zu bezeichnen. κ_a bzw. k_a hängen von der Energie und Potentialtiefe ab. Es gelten die impliziten Beziehungen

$$\kappa_a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E| \quad (1.22)$$

$$k_a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) \quad (1.23)$$

mit $V_0 > 0$. Zwischen k_a und κ_a gilt der Zusammenhang $k_a \cdot \tan(k_a b) = \kappa_a$. Diese Gleichung lässt sich analytisch nicht lösen. Unter Verwendung von $\kappa_a^2 + k_a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$ ist jedoch eine numerische Behandlung möglich.

²vgl. hierzu Glg. 4.41 in [Nolting, 2009]

Einsetzen dieser Wellenfunktion in die Ausdrücke für $h(0)$, $h(1)$ und $I(1)$ liefert in ausgeschriebener Form

$$h(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^-(x)^* \phi_A^-(x) h_0 dx = -2 \cdot V_0 \underbrace{\int_{a-b}^{a+b} \phi_a(x)^2 dx}_{I_0} \quad (1.24)$$

$$h(1) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^-(x)^* \phi_A^-(x-a) h_1 dx = -V_0 \underbrace{\int_{-b}^b \phi_b(x)^* \phi_a(x-a) dx}_{I_1} = h(-1) \quad (1.25)$$

$$\begin{aligned} I(1) &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_A^-(x)^* \phi_A^-(x-a) dx = \\ &= 2 \underbrace{\int_b^b \phi_b(x)^* \phi_a(x-a) dx}_{I_1} + \underbrace{\int_b^{a-b} \phi_c(x)^* \phi_a(x-a) dx}_{I_2} = I(-1) \end{aligned} \quad (1.26)$$

Diese Integrale ergeben mit der Wellenfunktion³ aus Glg. 1.20

$$I_0 = \alpha^2 \int_{a-b}^{a+b} e^{2\kappa_a x} dx = \alpha^2 \cdot \frac{(e^{4b\kappa_a} - 1) \cdot e^{-2\kappa_a(a+b)}}{2\kappa_a} \quad (1.27)$$

$$\begin{aligned} I_1 &= \alpha^2 \int_{-b}^b \frac{e^{-\kappa_a b}}{\cos(\kappa_a b)} \cdot \cos(k_a x) \cdot e^{\kappa_a(x-a)} dx = \\ &= \alpha^2 \frac{e^{-\kappa_a b}}{\cos(\kappa_a b)} \cdot \frac{e^{-\kappa_a(a+b)} (k_a (e^{2b\kappa_a} + 1) \sin(bk_a) + \kappa_a (e^{2b\kappa_a} - 1) \cos(bk_a))}{k_a^2 + \kappa_a^2} \end{aligned} \quad (1.28)$$

³Gelöst wurden diese Integrale unter Verwendung von *Mathematica*.

$$I_2 = \alpha^2 \int_b^{a-b} e^{-\kappa_a x} dx = \alpha^2 \cdot e^{-\kappa_a a} \cdot (a - 2b) \quad (1.29)$$

Mit diesen Abkürzungen lässt sich Glg. 1.16 als

$$E(k) = E_A + \frac{-2V_0 I_0 - 2V_0 I_1 \cos(ka)}{1 + (2I_1 + I_2) \cos(ka)} \quad (1.30)$$

schreiben.

1.3 Numerische Auswertung

Nach dieser Vorarbeit kann schließlich die Energie $E(k)$ in der Tight-Binding-Näherung berechnet werden. Notwendig hierzu sind jedoch noch Werte für k_a und κ_a . Hierzu wird die Beziehung $k_a \cdot \tan(k_a b) = \kappa_a$ ausgenutzt. Aufgrund der numerischen Herangehensweise müssen Werte für die Form des Potentialtopfs festgelegt werden. Diese seien

$$\begin{aligned} a &= 0.1 \text{ nm} \\ b &= 0.02 \text{ nm} \\ V_0 &= 1 \text{ eV} \end{aligned} \quad (1.31)$$

Mit diesen Werten ergibt die Gleichung

$$k_a^2 \cdot \tan^2(k_a b) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k_a^2 \quad (1.32)$$

die Näherungslösungen⁴ $k_a = 5.0967 \text{ nm}^{-1}$ und $\kappa_a = 0.5200 \text{ nm}^{-1}$. Diese können in Glg. 1.30 eingesetzt werden. Man erhält

$$E(k) = 0.010 + \frac{-0.038 - 0.043 \cdot \cos(0.1k)}{1 + 0.146 \cdot \cos(0.1k)} \quad (1.33)$$

mit k in nm^{-1} und $E(k)$ in eV .

⁴Diese wurden unter Verwendung von *WolframAlpha* bestimmt.

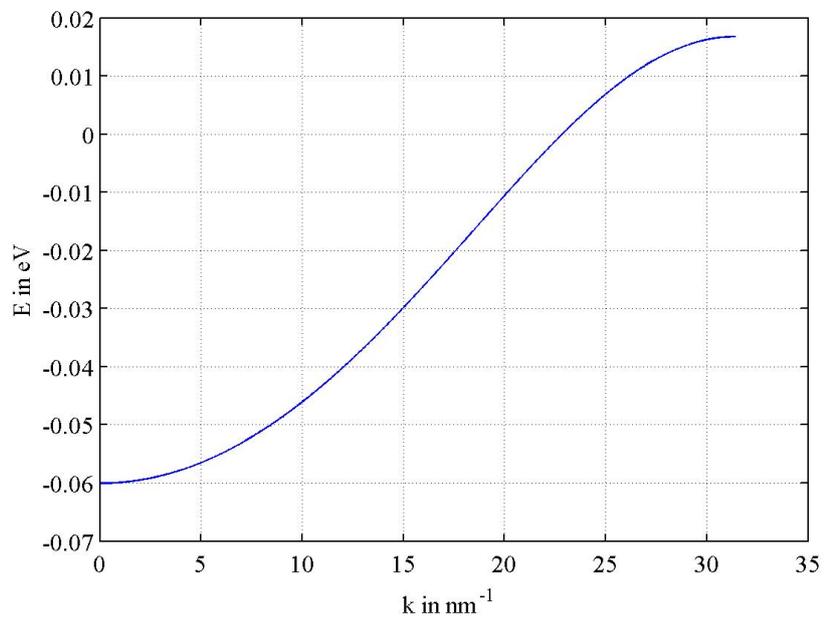


Abbildung 1.1: Verlauf der Energie in Abhängigkeit der Wellenzahl k

Literaturverzeichnis

[Nolting, 2009] Nolting, W. (2009). *Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik - Grundlagen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 7. edition.