9. Übungsblatt

Verteilung 20. November 2007
Besprechung 28./29. November 2007

Tight Binding Modell in einer Dimension

1. Die gebundenen, normierten Wellenfunktionen für das Deltapotential sind von der Form

$$\phi_0(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|},$$

wobei

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}.$$

Die Stetigkeit bei $x = 0$ ist gegeben, die Randbedingung für die erste Ableitung (siehe Übung 4, Aufgabe 1) von $\phi(x)$ bei $x = 0$ ergibt den Energieeigenwert E_0 für den (einzigen) gebundenen Zustand:

$$E_0 = -\frac{m u_0^2}{2\hbar^2}.$$

2. Mit dem Ansatz $\psi_k(x) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \phi_0(x - ja) e^{ikja}$ erhält man die um eine Gitterperiode verschobene Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}
\psi_k(x+a) &= \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \phi_0(x + a - ja) e^{ikja} \\
&= e^{ika} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \phi_0(x - (j-1)a) e^{ik(j-1)a} \\
&= e^{ika} \psi_k(x).
\end{aligned}$$

Das Bloch-Theorem ist also erfüllt.

3. Man erhält

$$\begin{aligned}
\int dx \phi_0(x) \left(H_0 + \Delta U\right) \psi_k(x) &= E(k) \int dx \phi_0(x) \psi_k(x) \\
\int dx \phi_0(x) H_0 \psi_k(x) + \int dx \phi_0(x) \Delta U \psi_k(x) &= E(k) I_1(k) \\
E_0 I_1(k) + I_2(k) &= E(k) I_1(k).
\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$E(k) = E_0 + \frac{I_2(k)}{I_1(k)}.$$

Für die Integrale $I_1(k)$ und $I_2(k)$ erhält man:

$$\begin{aligned}
I_1(k) &= \int dx \phi_0(x) \psi_k(x) \\
&= 1 + \sum_{j=1}^{+\infty} \left[e^{ikja} \int dx \phi_0(x) \phi_0(x - ja) + e^{-ikja} \int dx \phi_0(x) \phi_0(x + ja) \right] \\
&= 1 + \sum_{j=1}^{+\infty} 2 \cos(jka) \int dx \phi_0(x) \phi_0(x + ja) \\
&= 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \cos(jka),
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
I_2(k) &= \int dx\phi_0(x)\Delta U(x)\psi_k(x) \\
&= \int dx\phi_0(x)\Delta U(x)\phi_0(x) + \sum_{j=1}^{+\infty}\left[e^{ikja}\int dx\phi_0(x)\Delta U(x)\phi_0(x-ja) + e^{-ikja}\int dx\phi_0(x)\Delta U(x)\phi_0(x+ja)\right] \\
&= \beta + \sum_{j=1}^{+\infty} 2\cos(jka)\int dx\phi_0(x)\Delta U(x)\phi_0(x+ja) \\
&= \beta + \sum_{j=1}^{\infty}\gamma_j\cos(jka).
\end{aligned}
$$

Damit lautet die Dispersionsrelation

$$
E(k) = E_0 + \frac{\beta + \sum_{j=1}^{\infty}\gamma_j\cos(jka)}{1+\sum_{j=1}^{\infty}\alpha_j\cos(jka)}.
$$

Die Integrale α_j, β und γ_j berechnet man wie folgt:

$$
\begin{aligned}
\alpha_j &= 2\int dx\phi_0(x)\phi_0(x+ja) \\
&= 2\kappa\int dx\exp(-\kappa|x|)\exp(-\kappa|x+ja|) \\
&= 2\kappa\left\{e^{\kappa ja}\int_{-\infty}^{-ja} dx\exp(2\kappa x) + e^{-\kappa ja}\int_{-ja}^{0} dx\right. \\
&\quad \left. + e^{-\kappa ja}\int_{0}^{+\infty} dx\exp(-2\kappa x)\right\} \\
&= 2\,(1+\kappa ja)\,e^{-\kappa ja} \\
\beta &= \int dx\phi_0(x)\Delta U(x)\phi_0(x) \\
&= -\sum_{j=1}^{\infty}u_0\kappa\int dxe^{-2\kappa|x|}\left[\delta(x-ja)+\delta(x+ja)\right] \\
&= -2u_0\kappa\sum_{j=1}^{\infty}e^{-2\kappa ja} \\
&= -4\,|E_0|\,\frac{e^{-2\kappa a}}{1-e^{-2\kappa a}} \\
\gamma_j &= 2\int dx\phi_0(x)\Delta U(x)\phi_0(x+ja) \\
&= -2u_0\kappa\sum_{n=1}^{\infty}\int dxe^{-\kappa|x|}e^{-\kappa|x+ja|}\left[\delta(x-na)+\delta(x+na)\right] \\
&= -4\,|E_0|\sum_{n=1}^{\infty}e^{-\kappa an}\left[e^{-\kappa a(j+n)}+e^{-\kappa a|j-n|}\right] \\
&= -4\,|E_0|\left[je^{-\kappa aj}+2\frac{e^{-\kappa a(j+2)}}{1-e^{-2\kappa a}}\right].
\end{aligned}
$$

Wegen $\kappa a \gg 1$ berücksichtigen wir nur Glieder bis zur Ordnung $\exp(-\kappa a)$ und erhalten

$$
\begin{aligned}
\alpha_j &= \begin{cases} 2(1+\kappa a)e^{-\kappa a} \text{ für } j=1 \\ 0 \text{ sonst} \end{cases} \\
\beta &= 0 \\
\gamma_j &= \begin{cases} -2\,|E_0|\,e^{-\kappa a} \text{ für } j=1 \\ 0 \text{ sonst} \end{cases}
\end{aligned}
$$

Damit vereinfacht sich die Dispersionsrelation zu

$$
E(k) = E_0 - \frac{4\,|E_0|\,e^{-\kappa a}\cos(ka)}{1+\alpha_1\cos(ka)} \approx E_0 - 4\,|E_0|\,e^{-\kappa a}\cos(ka).
$$

Der in k quadratische Term in der Taylorreihe für $E(k)$ wird von γ_1 bestimmt. Für die effektive Masse ergibt sich daher

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{\gamma_1 a^2} = \frac{\hbar^2}{4\,|E_0|\,a^2} e^{\kappa a} = m \cdot \frac{e^{\kappa a}}{2(\kappa a)^2}.$$

Die effektive Masse hängt vom Parameter κa ab. Da $\kappa a \gg 1$, ist die effektive Masse in diesem Band deutlich grösser als die des freien Elektrons. Ausserdem gilt: Je kleiner das Überlappintegral γ_1 ist, desto grösser ist die effektive Masse.