第五节　紧束缚近似

$$\psi_{\alpha}(\vec{k},\vec{r})=u_{\alpha}(\vec{k},\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

由于 $\vec{k}=\vec{k}+\vec{K}_h$ （$\vec{K}_h$ 为倒格矢）

在波矢空间中，**Bloch**函数是周期函数，其周期与倒格子周期相同。

Bloch函数可在 $\vec{k}$ 空间中展成Fourier级数

$$\psi_{\alpha}(\vec{k},\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n} a_{\alpha}(\vec{R}_n,\vec{r}) \exp^{(i\vec{k}\cdot\vec{R}_n)}$$

$a_{\alpha}(\vec{R}_n,\vec{r})$----**Wannier函数**

可以证明：

- Wannier函数具有定域特性，

  即：Wannier函数是以格点 $\vec{R}_n$ 为中心的波包。

- 不同能带、不同格点的Wannier函数是正交的。

当每个原子的势场对电子束缚很强时

当电子距某原子较近时，电子的行为与孤立原子中电子的行为相似

选孤立原子的电子波函数 $\varphi_{\alpha}^{at}(\vec{r}-\vec{R}_n)$ 为Wannier函数

当束缚很强时，电子波函数为:

$$\psi_\alpha(\vec{k},\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \varphi_\alpha^{at}(\vec{r}-\vec{R}_n)\exp^{(i\vec{k}\cdot\vec{R}_n)}$$

将该波函数代入Schrodinger方程

并求解，得:

S能带的电子能量:

$$E_s(\vec{k}) = E_s^{at} + C_s - J \sum_{\vec{R}_n}^{\text{最近邻}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$$

E_s^{at}----孤立原子S电子的能量

C_s---库仑能（$C_s < 0$）　　$J = -J_s > 0$

J_s ----原子间电子云的交迭积分

课堂练习

1. 求简立方晶体S电子的能带结构

2. 求面立方晶体S电子的能带结构

3. 求体立方晶体S电子的能带结构

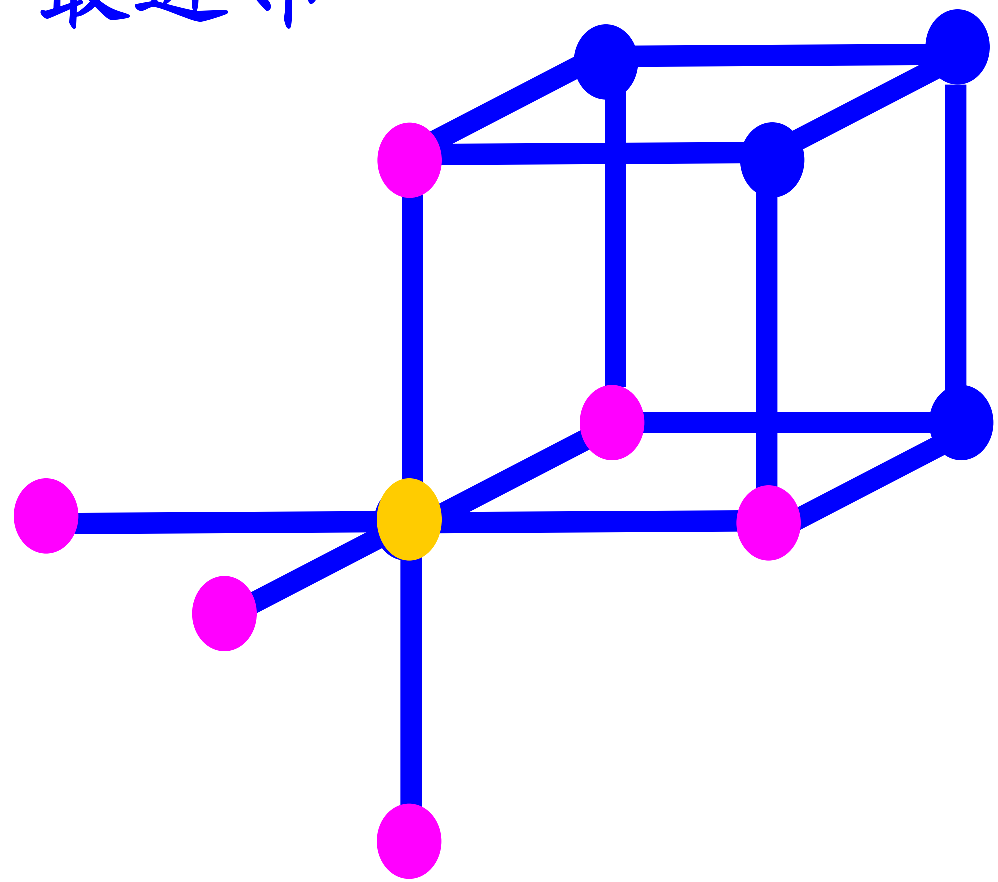
1. 求简立方晶体S电子的能带结构

每个原子有6个最近邻

$$(\pm a,0,0)$$

$$(0,\pm a,0)$$

$$(0,0,\pm a)$$



将最近邻点的坐标代入到能量表达式中：

$$E_s(\vec{k}) = E_s^{at} + C_s - J \sum_{\vec{R}_n}^{\text{最近邻}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$$

$$\vec{k}\cdot\vec{R}_n = \left(k_x\hat{i} + k_y\hat{j} + k_z\hat{k}\right)\cdot\left(x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}\right)$$

$$= k_x x + k_y y + k_z z$$

$$(\pm a,0,0) \longrightarrow \vec{R}_n = \pm a\hat{i}$$

$$(0,\pm a,0) \longrightarrow \vec{R}_n = \pm a\hat{j}$$

$$(0,0,\pm a) \longrightarrow \vec{R}_n = \pm a\hat{k}$$

$$E(\vec{k}) = E_s^{at} + C_s$$

$$-J\left[\begin{array}{l} e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} \\ \\ + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a} \end{array}\right]$$

$$E(\vec{k}) = E_s^{at} + C_s$$

$$-2J\left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)\right]$$

最小值在 $k_x = k_y = k_z = 0$ 处

$$E_{\min} = E_s^{at} + C_s - 6J$$

最大值在 $k_x = k_y = k_z = \dfrac{\pi}{a}$ 处

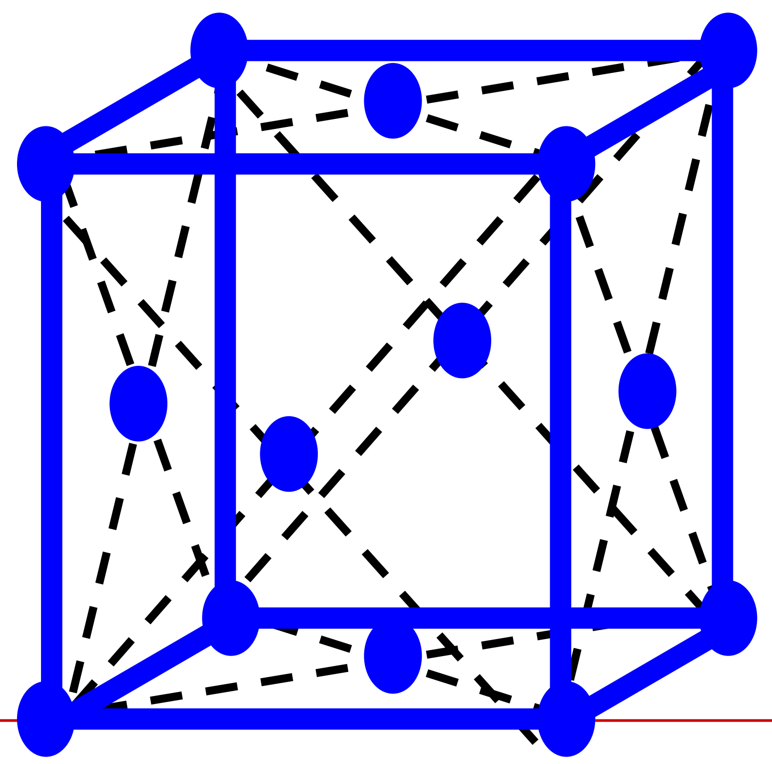
$$E_{\max} = E_s^{at} + C_s + 6J$$

能带宽度:

$$\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 12J$$

2. 求面心立方晶体S电子的能带结构

每个原子有12个最近邻



$$\frac{a}{2}(1,1,0) \qquad \frac{a}{2}(1,0,1) \qquad \frac{a}{2}(0,1,1)$$

$$\frac{a}{2}(-1,-1,0) \qquad \frac{a}{2}(-1,0,-1) \qquad \frac{a}{2}(0,-1,-1)$$

$$\frac{a}{2}(-1,1,0) \qquad \frac{a}{2}(1,0,-1) \qquad \frac{a}{2}(0,-1,1)$$

$$\frac{a}{2}(1,-1,0) \qquad \frac{a}{2}(-1,0,1) \qquad \frac{a}{2}(0,1,-1)$$

$$E_s(\vec{k}) = E_s^{at} + C_s$$

$$- 4J\left[\cos\left(\frac{k_x}{2}a\right)\cos\left(\frac{k_y}{2}a\right) + \cos\left(\frac{k_x}{2}a\right)\cos\left(\frac{k_z}{2}a\right) + \cos\left(\frac{k_y}{2}a\right)\cos\left(\frac{k_z}{2}a\right)\right]$$

3. 求体立方晶体S电子的能带结构

$$\frac{a}{2}(1,1,1) \qquad \frac{a}{2}(-1,-1,-1)$$

$$\frac{a}{2}(-1,1,1) \qquad \frac{a}{2}(1,1,-1) \qquad \frac{a}{2}(1,-1,1)$$

$$\frac{a}{2}(-1,-1,1) \qquad \frac{a}{2}(1,-1,-1) \qquad \frac{a}{2}(-1,1,-1)$$

$$E(\vec{k}) = E_s^{at} + C_s$$

$$-8J\cos(\frac{1}{2}k_x a)\cos(\frac{1}{2}k_y a)\cos(\frac{1}{2}k_z a)$$