Quantentheorie (WS 2017/18) **Blatt 9** **Prof. Rohlfing**

Ausgabe: 05.12.2017, Rückgabe: 12.12.2017, Besprechung: 14.12.2017

Aufgabe 22: Tight-Binding-Methode (mündlich, 6 Punkte)

Betrachten Sie ein zweidimensionales, quadratisches Gitter mit dem Atomabstand a. Berechnen Sie hierfür die Energie im Tight-Binding-Modell. Dabei sollen nur Wechselwirkungen bis zum übernächsten Nachbarn berücksichtigt werden mit

$$\langle i|H|j\rangle = \begin{cases} -t_1 & \text{falls } i,\, j \text{ nächste Nachbarn (Abstand } a) \\ t_2 & \text{falls } i,\, j \text{ übernächste Nachbarn (Abstand } \sqrt{2}\,a) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad .$$

Die Matrixelemente $\langle i|H|j\rangle$ sind hier wie in der Vorlesung definiert.

a) [3P] Berechnen Sie die Dispersionsrelation $\varepsilon\,(\vec{k})$ mit $\vec{k} = (k_x,\, k_y)$.

b) [3P] Plotten Sie diese entlang der Linien

$$(0,\,0) \to \left(\frac{\pi}{a},\,0\right)\,, \qquad \left(\frac{\pi}{a},\,0\right) \to \left(\frac{\pi}{a},\,\frac{\pi}{a}\right) \qquad \text{und} \qquad \left(\frac{\pi}{a},\,\frac{\pi}{a}\right) \to (0,\,0)$$

für

i) $t_1 = 0.25$ eV und $t_2 = 0$,

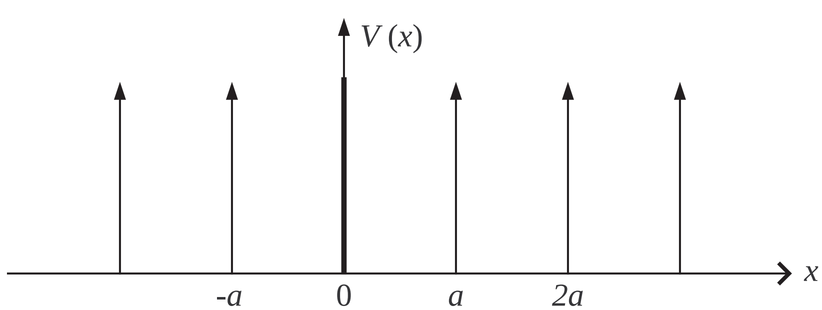
ii) $t_1 = 0.25$ eV und $t_2 = 0.1\,t_1$.

Aufgabe 23: Kronig-Penney-Modell (schriftlich 10 Punkte, mündlich 4 Punkte)

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m in dem eindimensionalen Potenzial

$$V\,(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0\,\delta\,(x - n\,a)\ ,$$

welches offenbar gitterperiodisch mit Gitterkonstante a ist:



Untersuchen Sie für beliebiges k mit $-\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$ die Energie-Eigenwerte der Schrödinger-Gleichung $H\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$, wobei $\psi\,(x) = e^{i\,k\,x}\,u\,(x)$ mit gitterperiodischem $u\,(x)$ gilt (Bloch-Theorem, $u\,(x + n\,a) = u\,(x)$).

Gehen Sie hierbei folgendermaßen vor:

a) [3P] Setzen Sie (bei vorgegebener Energie E) $\psi(x)$ in jedem Teilintervall $(n-1)\,a < x < n\,a$ als

$$\psi_n(x) = A_n\, e^{i\,q\,x} + B_n\, e^{-i\,q\,x} \qquad \text{mit} \qquad E = \frac{\hbar^2 q^2}{2\,m}$$

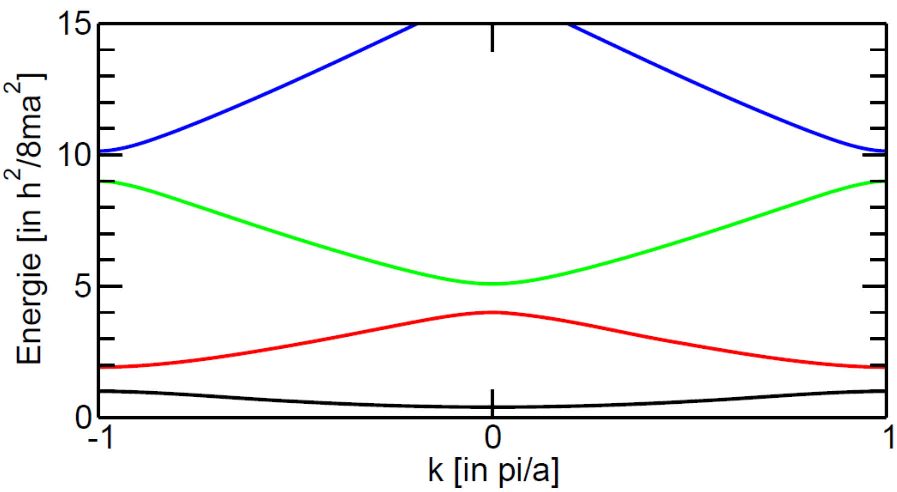
an. Bestimmen Sie die Anschlussbedingungen zwischen A_n, B_n, A_{n+1} und B_{n+1} bei $x = n\,a$.

b) [3P] Zeigen Sie unter Verwendung des Bloch-Theorems, dass $A_{n+1} = A_n\, e^{i\,a\,(k-q)}$ und $B_{n+1} = B_n\, e^{i\,a\,(k+q)}$ gelten muss.

c) [2P] Zeigen Sie, dass aus a) und b) folgt, dass

$$\cos(k\,a) = \cos(q\,a) + \frac{m\,V_0}{\hbar^2\,q}\,\sin(q\,a)$$

gelten muss. Das ist nur für diskrete Werte für q erfüllbar. Mit $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2\,m}$ folgt daraus die folgende Energiedispersion (hier für einen bestimmten Wert für V_0):



d) [1P] Zeigen Sie, dass sich für $V_0 \to 0$ im untersten Band die Dispersion des freien Teilchens ergibt (in den höheren Bändern rückgeklappt übrigens auch).

e) [1P] Zeigen Sie, dass sich für $V_0 \to \infty$ die Energien des Kastenpotentials mit unendlich hohen Wänden ergeben.

[ab hier mündlich]

f) [1P] Bestimmen Sie für hinreichend kleines V_0 den untersten Energiewert bei $k = 0$ (d. h. das Minimum der Energien in obiger Abbildung).

g) [1P] Vergleichen Sie Ihr Ergebnis aus f) mit Störungsrechnung in 1. Ordnung, ausgehend vom freien Teilchen.

h) [2P] Bestimmen Sie für hinreichend kleines V_0 die Energielücken zwischen dem 1. und 2. Band bei $k = \pm\,\pi/a$ sowie zwischen den 2. und 3. Band bei $k = 0$.