Übungen zur theoretischen Festkörperphysik I - Zettel 5

Wintersemester 11/12 Abgabe: 10.01.

Aufgabe 15: Hellmann-Feynman-Theorem (2P)

Gegeben sei ein hermitescher Operator $H(\lambda)$, der vom Parameter λ abhängt. $H(\lambda)$ erfüllt die Eigenwertgleichung

$$H(\lambda)\psi_n(\vec{r},\lambda) = E_n(\lambda)\psi_n(\vec{r},\lambda) \quad \text{mit} \quad \int d^3r \psi_n^*(\vec{r},\lambda)\psi_{n',\lambda}(\vec{r},\lambda) = \delta_{n,n'}.$$

Zeigen Sie:

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}E_n(\lambda) = \int d^3r \psi_n^*(\vec{r},\lambda)\left(\frac{\partial}{\partial\lambda}H(\lambda)\right)\psi_n(\vec{r},\lambda).$$

Tipp: Nutzen Sie die Eigenwertgleichung und die Normierung aus.

Aufgabe 16: Impuls eines Blochelektrons (4P)

a) Berechnen Sie den Erwartungswert des Impuls $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ für eine ebene Welle mit $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$.

b) Berechnen Sie den Erwartungswert des Impuls $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ für den Blochzustand mit $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{\vec{k}}(\vec{r})$. Stellen Sie das Ergebnis als Integral über $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ dar.

c) Erinnern Sie sich an die Schrödingergleichung für $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ aus der Vorlesung:

$$h_{\vec{k}}(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{k})u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Benutzen Sie das Hellmann-Feynman-Theorem (s. Aufgabe 15) um die Ableitung

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}}E_{\vec{k}} = \vec{\nabla}_{\vec{k}}\frac{1}{V}\int d^3r u_{\vec{k}}^*(\vec{r})\, h_{\vec{k}}(\vec{r})\, u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad \vec{\nabla}_{\vec{k}} = \left(\frac{\partial}{\partial k_x}, \frac{\partial}{\partial k_y}, \frac{\partial}{\partial k_z}\right)$$

zu berechnen. Wie hängt das Ergebnis mit dem Erwartungswert aus Aufgabenteil (b) zusammen?

Aufgabe 17: Elektronen im cosinus-Potential (6P)

Wir betrachten das 1-dimensionale Potential

$$V_G(x) = 2V_1\cos(gx)$$

mit den Gittervektoren $\vec{a} = n a\vec{e}_x$ und der Gitterperiode $a = \frac{2\pi}{g}$.

a) Zeigen Sie, dass V_G gitterperiodisch ist.

b) Wir nehmen den Ansatz

$$\phi_k(x) = Ae^{ikx} + Be^{i(k-g)x}.$$

Wie lautet die gitterperiodische Blochfunktion?

c) Setzen Sie ϕ_k in die Schrödingergleichung ein und bestimmen Sie die Koeffizienten zu e^{ingx} für $n = 0$ und $n = -1$ und vernachlässigen Sie die Kopplungen zu Termen mit allen anderen n.

d) Ermitteln Sie aus der Lösbarkeitsbedingung die Energiewerte $\varepsilon(k)$.

e) Zeichen Sie $\varepsilon(k)$ und diskutieren Sie das Ergebnis. Wo sind Bänder und wo Bandlücken? Achten Sie dabei auf einen geeigneten plot-Bereich mit positivem k. Benutzen Sie zum Zeichnen ein geeignetes Programm und setzen Sie für $(\frac{2m}{\hbar^2})^2 a^2 V_1^2$ die Werte 0 und 1 und 10 ein.

Aufgabe 18: Tight-binding in 2D (4+4P)

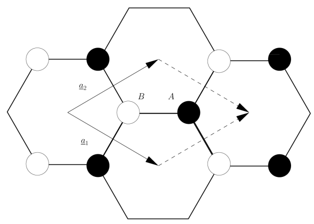
quadratisches Gitter:
Betrachten Sie ein zweidimensionales, quadratisches Gitter mit der Gitterkonstanten a und rechnen Sie dafür die Energie im Tight-Binding Modell aus. Dabei sollen nächste und übernächste Nachbarn berücksichtigt werden mit

$$H = \begin{cases} -t_1 & \text{falls } \vec{R} \text{ nächster Nachbar-Vektor} \\ t_2 & \text{falls } \vec{R} \text{ übernächster Nachbar-Vektor} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Berechnen Sie die Dispersionsrelation und plotten Sie diese entlang der Linien $(0,0) \to (\frac{\pi}{a}, 0)$, $(\frac{\pi}{a}, 0) \to (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ und $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) \to (0,0)$. Setzen Sie dafür $t_1 = \frac{1}{4}$ eV und zunächst $t_2 = 0$ und dann $t_2 = 0.1 t_1$. Entwickeln Sie $\varepsilon(\vec{k})$ für kleine k und bestimmen Sie die effektive Masse m^*.

Graphen:

Graphen ist ein zweidimensionales Gitter aus Kohlenstoffatomen, dessen Einheitszelle zwei Kohlenstoffatome enthält.



Weil nun 2 Atome pro Einheitszelle vorhanden sind, ergibt sich im Rahmen des Tight-Binding Modells mit nächster-Nachbar Wechselwirkung folgende Eigenwert-Gleichung zur Bestimmung der Energien:

$$det \begin{pmatrix} \varepsilon(\vec{k}) & t(1 + e^{i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\vec{a}_2}) \\ t(1 + e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\vec{a}_2}) & \varepsilon(\vec{k}) \end{pmatrix} = 0$$

mit dem Parameter t und den Einheitsvektoren

$$\vec{a}_1 = \frac{3}{2} a \vec{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2} a \vec{e}_y \qquad \text{und} \qquad \vec{a}_2 = \frac{3}{2} a \vec{e}_x - \frac{\sqrt{3}}{2} a \vec{e}_y .$$

Berechnen und plotten Sie die Dispersion der Elektronen. Zeichnen Sie außerdem die Dispersion entlang der Linie $k_x = 0$. Bestimmen Sie (z.B. mit Maple oder Mathematika) die Nullstelle. Betrachten Sie das Verhalten der Dispersion an dieser Nullstelle. Was ist ungewöhnlich?