2. Übung zur Einführung in die Festkörpertheorie (WS 2013/14) **Prof. Krüger**

Ausgabedatum: 08.11.2013 Abgabedatum: 15.11.2013

Aufgabe 4: Impuls eines Blochelektrons (3 Punkte)

Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\,\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}}\,\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

mit

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\,m} + V(\vec{r}) \qquad \text{und} \qquad V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$$

lassen sich in der Form

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

darstellen. Dabei ist $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ eine gitterperiodische Funktion.

a) Zeigen Sie, dass

$$\hat{\vec{p}}\,\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\,\vec{r}}\left(\hbar\,\vec{k} + \hat{\vec{p}}\right)u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

gilt und dass $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ die Eigenwertgleichung

$$\hat{\tilde{H}}(\vec{k})\,u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}}\,u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

mit

$$\hat{\tilde{H}}(\vec{k}) = \frac{1}{2\,m}\left(\hbar\,\vec{k} + \hat{\vec{p}}\right)^2 + V(\vec{r})$$

erfüllt.

b) Zeigen Sie, dass sich $\hat{\tilde{H}}(\vec{k})$ in folgender Form darstellen lässt:

$$\hat{\tilde{H}}(\vec{k}) = \mathrm{e}^{-i\,\vec{k}\,\vec{r}}\,\hat{H}(\vec{r})\,\mathrm{e}^{i\,\vec{k}\,\vec{r}}\,.$$

Wenden Sie dazu $\hat{\tilde{H}}(\vec{k})$ auf eine Funktion $f(\vec{r})$ an.

c) Stellen Sie den Erwartungswert des Impulsoperators

$$\langle\hat{\vec{p}}\rangle = \int \psi^*_{n,\vec{k}}(\vec{r})\,\hat{\vec{p}}\,\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})\,d^3\,r$$

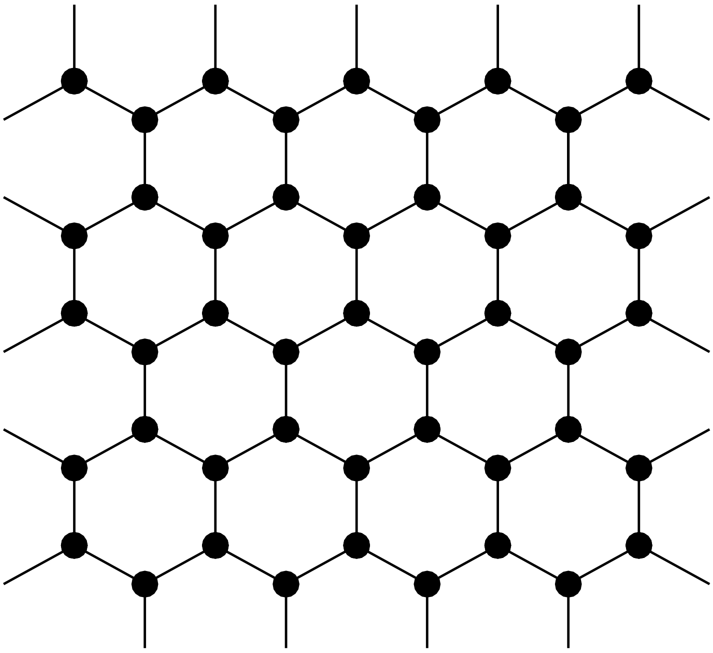
durch ein Integral über $u^*_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ und $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ dar.

Aufgabe 5: Punktgruppe von Graphen (3 Punkte)

Graphen besteht aus einer Schicht von Kohlenstoffatomen, die in einer hexagonalen Struktur angeordnet sind.

a) Fassen Sie zunächst Graphen als rein *zweidimensionale* Struktur auf. Welche Symmetrieoperationen lassen diese Struktur invariant? Geben Sie diese gemäß der Schönflies-Notation (siehe Materialien zur Vorlesung) an und beschreiben Sie diese kurz (z. B. C_2: Drehung um 180° um z-Achse). Markieren Sie die entsprechenden Drehachsen und Spiegelebenen in der Abbildung. Welche Punktgruppe bilden diese Operationen?

b) Betrachten Sie jetzt Graphen als eine Schicht von Kohlenstoffatomen, die sich im *dreidimensionalen* Raum in der x-y-Ebene bei $z = 0$ befinden. Welche zusätzlichen Symmetrieoperationen lassen diese Struktur invariant? Welche Punktgruppe bilden *alle* Symmetrieoperationen?

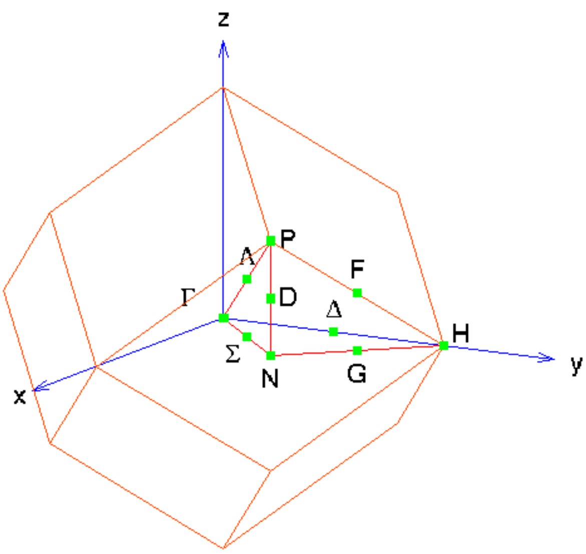


Aufgabe 6: Bandstruktur von Na **(4 Punkte)**

Natrium kristallisiert in einer bcc-Struktur mit einer Gitterkonstanten von $a = 4{,}23\,\text{Å}$. Das Festkörperpotential sei eine Überlagerung von atomaren Potentialen, die durch Gaußfunktionen dargestellt werden:

$$V(\vec{r}\,) = V_0 \left(\left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{3/2} \frac{1}{\Omega_0} - \sum_l \mathrm{e}^{-\gamma\,(\vec{r} - \vec{R}_l)^2} \right) .$$

Dabei ist Ω_0 das Volumen der Elementarzelle. Die Summe der Gittervektoren $\vec{R}_l$ erstreckt sich über den gesamten $\mathbb{R}^3$.



Die Bandstruktur des Kristalls soll entlang der Hochsymmetrielinien Λ, Σ und D (siehe Abbildung) von

$$P\left(\vec{k} = \frac{\pi}{a}\,(1,\,1,\,1)\right)$$

über

$$\Gamma\left(\vec{k} = (0,\,0,\,0)\right)$$

nach

$$N\left(\vec{k} = \frac{\pi}{a}\,(0,\,1,\,1)\right)$$

und wieder nach P berechnet werden. Dabei soll eine Entwicklung der Wellenfunktion nach ebenen Wellen verwendet werden.

a) Bestimmen Sie die reziproken Gittervektoren $\vec{b}_j$ des bcc-Kristalls.

b) Benutzen Sie zwei ebene Wellen mit $\vec{G}_1 = (0,\,0,0)$ und $\vec{G}_2 = \frac{2\,\pi}{a}\,(0,\,-1,\,-1)$, um die Bandstruktur zu berechnen.

Geben Sie die resultierende Hamiltonmatrix $H_{\vec{G}_j,\vec{G}_{j'}}$ an. Zeichnen Sie zunächst die Bandstruktur für $V_0 = 0$ eV. Zeichnen Sie dann die Bandstruktur für $V_0 = 30$ eV und $\gamma = 0,2\,\frac{1}{\text{Å}^2}$. Wie groß ist die Aufspaltung $\Delta\,E$ der Bänder am N-Punkt?

c) *Für alle, die noch nicht genug haben:* Falls Sie eine genauere Berechnung der Bandstruktur durchführen möchten, so müssen Sie *alle* Gittervektoren mit $|\vec{G}_j| \leq \frac{2\,\pi}{a}\,\sqrt{2}$ bei der Entwicklung der Wellenfunktion benutzen.

Diagonalisieren Sie die zugehörige Hamiltonmatrix numerisch und zeichnen Sie die entsprechende Bandstruktur.

Hinweise:

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{e}^{-\gamma\,r^2}\,\mathrm{e}^{i\,\vec{G}\,\vec{r}}\,d^3\,r \;=\; \left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{3/2}\,\mathrm{e}^{-\frac{|\vec{G}|^2}{4\,\gamma}}$$

$$\frac{\hbar^2}{2\,m} \;=\; 3{,}80998\ \text{eV}\,\cdot\,A^2\ .$$