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

Ausgabedatum: 26.11.2013 Abgabedatum: 03.12.2013

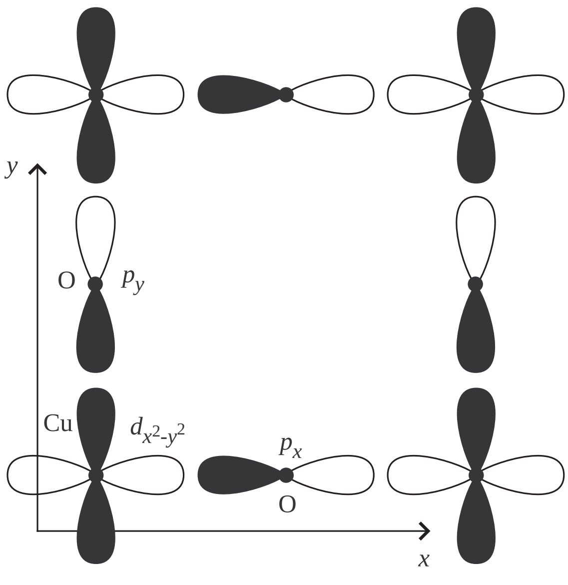
Aufgabe 7: ETBM Bandstruktur von Natrium (2 Punkte)

Berechnen Sie die Bandstruktur von Natrium (siehe Aufgabe 6) im Rahmen der empirischen Tight-Binding-Methode unter Verwendung von einem s-Orbital pro Atom. Berücksichtigen Sie dabei nur die Wechselwirkungen zwischen benachbarten Atomen. Bestimmen Sie die Parameter E_s und V_{ss} so, dass das unterste Band aus der Rechnung mit 13 ebenen Wellen möglichst gut reproduziert wird, d. h. dass $E\,(\Gamma) = 0$ eV und $E\,(P) = 5{,}7$ eV sind. Skizzieren Sie $E_{\vec{k}}$ entlang der Hochsymmetrielinien Λ, Σ und D. Vergleichen Sie Ihr Resultat mit den Ergebnissen von Aufgabe 6.

Aufgabe 8: Bandstruktur einer CuO_2-Ebene (3 Punkte)

Hochtemperatursupraleiter, die aus Verbindungen von Kupferoxid mit seltenen Erden bestehen, besitzen kristallographische Ebenen, die eine quadratische Anordnung von Cu- und O-Atomen aufweisen (Gitterkonstante a). Berechnen Sie im Rahmen der empirischen Tight-Binding-Methode die Bandstruktur einer solchen Ebene. Verwenden Sie dabei ein $d_{x^2-y^2}$-Orbital an dem Kupferatom und ein p_x- bzw. p_y-Orbital an den beiden Sauerstoffatomen in jeder Einheitszelle (siehe Abbildung). Berücksichtigen Sie nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn. Zeichnen Sie die Energiebänder entlang der Randlinien des irreduziblen Teils der zweidimensionalen Brillouinzone. Benutzen Sie dabei folgende Werte für die Parameter:

$$E_d^{\mathrm{Cu}} = -3{,}2 \text{ eV}\,, \qquad E_p^{\mathrm{O}} = -3{,}2 \text{ eV} \qquad \text{und} \qquad V_{pd\sigma} = -1{,}85 \text{ eV}\,.$$



Hinweis: Für die Matrixelemente des Hamiltonoperators gilt:

$$M_{d_{x^2-y^2},p_x}(0,\vec{B}) = -\frac{1}{2}\,l\,(l^2 - m^2)\left(\sqrt{3}\,V_{pd\sigma} - 2\,V_{pd\pi}\right) - l\,V_{pd\pi}$$

$$M_{d_{x^2-y^2},p_y}(0,\vec{B}) = -\frac{1}{2}\,m\,(l^2 - m^2)\left(\sqrt{3}\,V_{pd\sigma} - 2\,V_{pd\pi}\right) + m\,V_{pd\pi}$$

mit

$$l = \frac{B_x}{|\vec{B}|}\,, \qquad m = \frac{B_y}{|\vec{B}|}\,.$$

Aufgabe 9: **Hellmann-Feynman-Theorem** **(2 Punkte)**

Gegeben sei ein hermitescher Operator $\hat{H}(\lambda)$, der von dem Parameter λ abhängt. $\hat{H}(\lambda)$ erfüllt die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}(\lambda)\,\varphi_{n,\lambda}(\vec{r}) = E_n(\lambda)\,\varphi_{n,\lambda}(\vec{r})$$

mit

$$\int \varphi^*_{n,\lambda}(\vec{r})\,\varphi_{n',\lambda}(\vec{r})\,d^3 r = \delta_{n,n'}\ .$$

$E_n(\lambda)$ und $\varphi_{n,\lambda}(\vec{r})$ hängen dabei parametrisch von λ ab.

a) Zeigen Sie, dass

$$\frac{\partial}{\partial\lambda} E_n(\lambda) = \int \varphi^*_{n,\lambda}(\vec{r})\left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\hat{H}(\lambda)\right)\varphi_{n,\lambda}(\vec{r})\,d^3 r$$

gilt.

b) Wie lässt sich für $m \neq n$ der Term

$$\int \varphi^*_{m,\lambda}(\vec{r})\,\frac{\partial}{\partial\lambda}\varphi_{n,\lambda}(\vec{r})\,d^3 r$$

aus

$$\int \varphi^*_{m,\lambda}(\vec{r})\,\frac{\partial}{\partial\lambda}\hat{H}(\lambda)\,\varphi_{n,\lambda}(\vec{r})\,d^3 r$$

berechnen?

Aufgabe 10: **Zeitumkehr** **(3 Punkte)**

a) Der Vektor der Pauli-Matrizen ist durch

$$\underline{\underline{\vec{\sigma}}} = \left(\underline{\underline{\sigma_x}}, \underline{\underline{\sigma_y}}, \underline{\underline{\sigma_z}}\right)$$

gegeben. Beweisen Sie die folgende Beziehung:

$$\underline{\underline{\sigma_y}}^{-1}\,\underline{\underline{\vec{\sigma}}}\,\underline{\underline{\sigma_y}} = -\underline{\underline{\vec{\sigma}}}^{\,*}\ .$$

(Analog gilt in Operatordarstellung: $\hat{\sigma}_y^{-1}\,\hat{\vec{\sigma}}\,\hat{\sigma}_y = -\hat{\vec{\sigma}}^{\,*}$.)

b) Zeigen Sie, dass der Zeitumkehroperator $\hat{\mathcal{T}} = -i\,\hat{\sigma}_y\,\hat{K}$ für ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ die folgenden Eigenschaften hat:

1) $\hat{\mathcal{T}}\,\hat{\vec{r}} = \hat{\vec{r}}\,\hat{\mathcal{T}}$,
2) $\hat{\mathcal{T}}\,\hat{\vec{p}} = -\hat{\vec{p}}\hat{\mathcal{T}}$,
3) $\hat{\mathcal{T}}\,\hat{\vec{L}} = -\hat{\vec{L}}\,\hat{\mathcal{T}}$,
4) $\hat{\mathcal{T}}\,\hat{\vec{S}} = -\hat{\vec{S}}\,\hat{\mathcal{T}}$.

Dabei ist $\hat{K}$ durch $\hat{K}\,\psi = \psi^*$ definiert (Bildung des konjugiert Komplexen).

Hinweis: Wenden Sie zum Beweis der obigen Relationen die Operatoren auf eine Wellenfunktion ψ an.

c) Zeigen Sie, dass $\hat{\mathcal{T}}^{\,2}\,\psi = -\psi$ gilt.