Theoretische Festkörperphysik

Prof. F. Wegner, Universität Heidelberg, WS 05/06

6. Lösungsblatt
Abgabe Mittwoch, 7.12.05 zu Beginn der Vorlesung

Zur Aufgabe 10b)

Dieser Aufgabenteil kann auch am 7.12. abgegeben werden. Man betrachte die Orbitale $|\mathbf{R}_n, \delta\rangle$ und $|\mathbf{R}_n + \delta_1, -\delta\rangle$ (mit festem δ_1) als orthogonal zu einander und verwende die Wechselwirkungen (11.36) und (11.37) mit (11.38) aus der Vorlesung. Um auf die 8×8-Matrix zu kommen, führt man

$$|\mathbf{R}_n, \delta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}_n} |\mathbf{k}, \delta\rangle,$$
$$|\mathbf{R}_n + \delta', -\delta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}(\mathbf{R}_n+\delta')} |\mathbf{k}, -\delta\rangle$$

ein.

Lösung: 10 b) Wir formen den Anteil B aus der Wechselwirkung um

$$B = -t \sum_{n,\delta} |\mathbf{R}_n, \delta\rangle\langle \mathbf{R}_n + \delta, -\delta| + \text{h.c.} = -\frac{t}{N} \sum_{n,\delta,\mathbf{k},\mathbf{k}'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{R}_n - \mathrm{i}\mathbf{k}'(\mathbf{R}_n+\delta)} |\mathbf{k}, \delta\rangle\langle \mathbf{k}', -\delta| + \text{h.c.},$$

wobei h.c. das hermitesch Konjugierte bedeutet. Wir verwenden nun

$$\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_n} = N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$$

und erhalten

$$B = -t \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\delta} |\mathbf{k}, \delta\rangle\langle \mathbf{k}, -\delta|.$$

Wegen $\delta = \frac{a}{4}(v_1, v_2, v_3)$ folgt $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\delta} = q_1^{v_1} q_2^{v_2} q_3^{v_3}$ mit $q_i = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}v_i k_i a/4}$. Falls man die Orbitale anders angeordnet hat, kann auch $q_i = \mathrm{e}^{+\mathrm{i}v_i k_i a/4}$ herauskommen.

11) Elektronen auf dem Diamantgitter

In Fortsetzung der Aufgabe 10 eines Modells von Elektronen auf dem Diamantgitter bestehend aus zwei Untergittern $a(0,0,0) + \mathbf{R}_n$ und $a(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) + \mathbf{R}_n$ waren die

Elektronen-Energien gegeben durch die Eigenwerte der Matrix

$$\begin{pmatrix}
a & b & b & b & -tq_1q_2q_3 & 0 & 0 & 0 \\
b & a & b & b & 0 & -\frac{tq_1}{q_2q_3} & 0 & 0 \\
b & b & a & b & 0 & 0 & -\frac{tq_2}{q_1q_3} & 0 \\
b & b & b & a & 0 & 0 & 0 & -\frac{tq_3}{q_1q_2} \\
-\frac{t}{q_1q_2q_3} & 0 & 0 & 0 & a & b & b & b \\
0 & -\frac{tq_2q_3}{q_1} & 0 & 0 & b & a & b & b \\
0 & 0 & -\frac{tq_1q_3}{q_2} & 0 & b & b & a & b \\
0 & 0 & 0 & -\frac{tq_1q_2}{q_3} & b & b & b & a
\end{pmatrix},$$

wobei die q_i vom Betrag 1 sind und vom Wellenvektor abhängen. Je zwei Eigenwerte sind durch $-b+a+t$ und $-b+a-t$ gegeben.
Man kann zeigen, dass die anderen vier Eigenwerte durch

$$b + a \pm \sqrt{4b^2 + t^2 \pm bt\sqrt{r}}$$

gegeben sind, wobei r von den q_i abhängt.
a) Berechne r mittels Maple oder Mathematica.
Das Maple-Programm

```
with(linalg);
C:=[[a,b,b,b,-tt*q1*q2*q3,0,0,0],
[b,a,b,b,0,-tt*q1/q2/q3,0,0],
[b,b,a,b,0,0,-tt/q1*q2/q3,0],
[b,b,b,a,0,0,0,-tt/q1/q2*q3],
[-tt/q1/q2/q3,0,0,0,a,b,b,b],
[0,-tt/q1*q2*q3,0,0,b,a,b,b],
[0,0,-tt*q1/q2*q3,0,b,b,a,b],
[0,0,0,-tt*q1*q2/q3,b,b,b,a]];
eps:=eigenvals(C);
```

ergibt

```
                                                 2   2   2   2           1/2
         2 q1 q2 q3 a + 2 b q1 q2 q3 + 2 (4 b   q1  q3  q2  + %2 + %1)
eps := --------------------------------------------------------------,
                                  2 q1 q3 q2

                                               2   2   2   2           1/2
       2 q1 q2 q3 a + 2 b q1 q2 q3 - 2 (4 b   q1  q3  q2  + %2 + %1)
       --------------------------------------------------------------,
                                  2 q1 q3 q2
```

```
                                         2   2   2   2            1/2
     2 q1 q2 q3 a + 2 b q1 q2 q3 + 2 (4 b  q1  q3  q2  + %2 - %1)
     ---------------------------------------------------------------,
                               2 q1 q3 q2

                                         2   2   2   2            1/2
     2 q1 q2 q3 a + 2 b q1 q2 q3 - 2 (4 b  q1  q3  q2  + %2 - %1)
     ---------------------------------------------------------------,
                               2 q1 q3 q2

     -b + a + tt, -b + a - tt, -b + a + tt, -b + a - tt

                 2   2   2    2   2   2    2   2   2    2   2   4   2
%1 := q1 q3 q2 (b  tt  q2  + b  tt  q3  + b  tt  q1  + b  tt  q3  q2

        2   2   2   4    2   2   4   2    2   2   2   4    2   2   4   2
     + b  tt  q3  q2  + b  tt  q1  q3  + b  tt  q1  q3  + b  tt  q1  q2

        2   2   2   4     2   4   4   2  2     2   4   2   4  2
     + b  tt  q1  q2  + tt  q1  q3  q2  b  + tt  q1  q3  q2  b

        2   2   2   4   4      2   2   2   2   2 1/2
     + b  tt  q1  q3  q2  + 4 b  tt  q1  q3  q2 )

        2   2   2   2
%2 := tt  q1  q3  q2
```

Wir haben hier tt statt t geschrieben, da Maple t für spezielle Zwecke reserviert hat. Man sieht, dass Maple die Lösung nicht immer in der einfachsten Form liefert. Man kann jedoch $\epsilon_1 = a + b + \sqrt{4b^2 + t^2 + bt\sqrt{r}}$ nach r auflösen und faktorisieren und erhält

```
> r:=solve(eps[1]-a-b-sqrt(4*b^2+tt^2+b*tt*sqrt(r)),r);

        2     2     2     4   2     2   4     4   2     2   4     4   2
r := (q1  + q3  + q2  + q3  q2  + q3  q2  + q1  q3  + q1  q3  + q1  q2

         2   4     4   4   2     4   2   4     2   4   4       2   2   2   /
     + q1  q2  + q1  q3  q2  + q1  q3  q2  + q1  q3  q2  + 4 q1  q3  q2 ) /
                                                                         /

       2   2   2
    (q2  q3  q1 )
```

```
> factor(r);
          2   2   2     2     2     2     2   2     2   2         2   2
      (q1  q3  q2  + q1  + q3  + q2 ) (q1  q2  + q1  q3  + 1 + q3  q2 )
      ----------------------------------------------------------------
                                     2   2   2
                                   q1  q3  q2
```

Alternativ kann man von den beiden s-Zuständen starten und auf diese mehrfach die Matrix anwenden und dabei einen vier-dimensionalen Hilbertraum aufspannen, die zugehörige Matrix bestimmen und deren Eigenwerte. (4 P.)

Alternative Lösung: Da in den flachen Bändern nur p-Zustände stecken, müssen die s-Zustände

$$\xi_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \quad \xi_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$$

gänzlich in den vier anderen Eigenzuständen enthalten sein. Bezeichnet man die 8×8-Matrix mit $C := A + B$, so findet man

$$C\xi_1 = (a+3b)\xi_1 - t\xi_2, \quad C\xi_3 = (a+3b)\xi_3 - t\xi_4$$

mit

$$\xi_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\\frac{1}{q_1q_2q_3}\\\frac{q_2q_3}{q_1}\\\frac{q_1q_3}{q_2}\\\frac{q_1q_2}{q_3}\end{pmatrix}, \quad \xi_4 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}q_1q_2q_3\\\frac{q_1}{q_2q_3}\\\frac{q_2}{q_1q_3}\\\frac{q_3}{q_1q_2}\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}.$$

Mit diesen Zuständen schließt sich das Gleichungs-System zu

$$C\xi_2 = -t\xi_1 + (a-b)\xi_2 + ub\xi_3, \quad C\xi_4 = -t\xi_3 + (a-b)\xi_4 + u^*b\xi_1$$

mit

$$u = \frac{1}{q_1q_2q_3} + \frac{q_2q_3}{q_1} + \frac{q_1q_3}{q_2} + \frac{q_1q_2}{q_3}, \quad u^* = q_1q_2q_3 + \frac{q_1}{q_2q_3} + \frac{q_2}{q_1q_3} + \frac{q_3}{q_1q_2}.$$

Damit sind die Eigenwerte der Matrix

$$\begin{pmatrix} a+3b & -t & 0 & 0 \\ -t & a-b & bu & 0 \\ 0 & 0 & a+3b & -t \\ bu^* & 0 & -t & a-b \end{pmatrix}$$

zu bestimmen. Da die Zustände ξ_i nicht orthogonalisiert sind, braucht die Matrix nicht hermitesch sein. Ziehen wir von der Matrix ϵ mal der Einheitsmatrix ab und bilden die Determinante, so erhalten wir

$$\det(C - \epsilon 1) = [(a+3b-\epsilon)(a-b-\epsilon) - t^2]^2 - t^2b^2uu^*.$$

Dies ist gleich Null zu setzen und ergibt

$$\epsilon = a + b \pm \sqrt{4b^2 + t^2 \pm bt\sqrt{uu^*}}.$$

Man überzeugt sich leicht, dass dieses $r = uu^*$ mit dem von Maple berechneten übereinstimmt.

b) In Abhängigkeit des Wellenvektors $\mathbf{k}$ variiert r zwischen 0 und 16. In welchem Energie-Bereich erstrecken sich die Bänder für $2b > t$ und für $2b < t$, wobei b und t positiv anzunehmen sind. (3 P.)

Lösung: Obiger Lösung entnimmt man, dass u maximal 4 ist, da alle $|q_i| = 1$. Den Maximalwert erreicht man zum Beispiel für $q_1 = q_2 = q_3 = 1$. Auch $u = 0$ ist möglich, z.B. für $q_1 = q_2 = 1$, $q_3 = \mathrm{i}$. Damit variiert $4b^2 + t^2 \pm bt\sqrt{uu^*}$ kontinuerlich zwischen $4b^2 + 4bt + t^2 = (2b+t)^2$ und $4b^2 - 4bt + t^2 = (2b-t)^2$.

Wenn nun $2b > t$, dann variiert

$$a + 3b - t \le \epsilon = a + b + \sqrt{4b^2 + t^2 \pm bt\sqrt{uu^*}} \le a + 3b + t,$$
$$a - b - t \le \epsilon = a + b - \sqrt{4b^2 + t^2 \pm bt\sqrt{uu^*}} \le a - b + t.$$

Wenn dagegen $2b < t$, dann variiert

$$a - b + t \le \epsilon = a + b + \sqrt{4b^2 + t^2 \pm bt\sqrt{uu^*}} \le a + 3b + t,$$
$$a - b - t \le \epsilon = a + b - \sqrt{4b^2 + t^2 \pm bt\sqrt{uu^*}} \le a + 3b - t.$$

12) Berechne die elektronische Zustandsdichte für ein eindimensionales Band mit Gitterkonstante a und der Dispersion

$$\epsilon(k) = -2t\cos(ka).$$

(4 P.)

Lösung: Man geht aus von

$$\mathrm{d}n = \frac{2}{2\pi}\mathrm{d}k = D\mathrm{d}\epsilon,$$

woraus

$$D = \frac{1}{\pi}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\epsilon}$$

folgt. Allerdings ist zu beachten, dass man alle Beiträge aufzusummieren hat, das sind hier zwei und zwar für k und $-k$. Wir finden

$$\frac{\mathrm{d}\epsilon}{\mathrm{d}k} = 2ta\sin(ka) = a\sqrt{4t^2 - \epsilon^2}.$$

Damit folgt dann für die Zustandsdichte einschließlich des oben angegebenen Faktors 2

$$D(\epsilon) = \frac{2}{\pi a\sqrt{4t^2 - \epsilon^2}}.$$