Theoretische Festkörperphysik

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

6. Übungsblatt
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

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

ein.

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.
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.)

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.)

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

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

(4 P.)