Goethe-Universität Frankfurt
Fachbereich Physik

Lehrende: Prof. Dr. Roser Valentí, Raum 01.130
Übungsgruppenleitung: Karim Zantout, Room 01.142

Frankfurt, 06.12.2019

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2019/20

Blatt 8

(Abgabe: 16.12.2019)

Aufgabe 1 (**Tight-Binding Modell**) (3 Punkte)

Gegeben sei ein einatomiger Kristall einfach kubischer Struktur mit Gitterparameter a. Im atomaren Limit (d.h. bei Betrachtung isolierter Atome) gebe es für jedes Atom n nur einen elektronischen Zustand $|n\rangle$ mit Energie E_0. Im Kristall hingegen überlappen die Orbitale nächster Nachbarn (Matrixelement t).

a) Wie lautet der Hamilton-Operator im Kristall in der Basis $|n\rangle$?

Hinweis: Der gesamte Hamiltonoperator ist die Summe aus den atomaren Hamiltonians und den Hopping-Termen.

b) Zeigen Sie, dass die Dispersionsrelation durch

$$E(\vec{k}) = E_0 + 2t \sum_{i=1}^{3} \cos(k_i a)$$

gegeben ist.

Hinweis: Die folgene Darstellung könnte dabei hilfreich sein:

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\vec{k}\vec{R}_n} |n\rangle$$

c) Betrachten Sie nun den eindimensionalen Fall einer Kette aus Atomen im Abstand a. Wie lautet die Zustandsdichte $\mathcal{D}(E)$? Skizzieren (bzw. plotten) Sie $\mathcal{D}(E)$.

Aufgabe 2 (**Kronig-Penney Modell in Tight-Binding Näherung**) (4 Punkte)

Wir betrachten eine eindimensionale Kette von Atomen im Abstand a, die ein Potential der Form $V(x) = -g \sum_n \delta(x - na)$ erzeugen.

a) Lösen Sie zunächst das atomare Problem. Bestimmen Sie dazu die Wellenfunktion und die zugehörige Energiedispersion. Plotten Sie anschliessend die Wellenfunktion für $m = \hbar = g = 1$.

b) Berechnen Sie nun die Dispersionsrelation für die eindimensionale Kette in Tight-Binding Näherung unter Verwendung der atomaren Wellenfunktionen aus Aufgabenteil a).

Aufgabe 3 (**Tight-Binding-Bandstruktur**) (3 Punkte)

Bestimmen Sie die Energiedispersion $\epsilon(\vec{k})$ von Elektronen auf einem 2D Dreiecksgitter lediglich unter Berücksichtigung von N"achstem-Nachbarn-Hüpfen t. Bestimmen Sie zudem numerisch die Zustandsdichte $D(E)$.