

Frankfurt, 29.11.2019

## Einführung in die Theoretische Festkörperphysik Wintersemester 2019/20

### Blatt 7

(Abgabe: 09.12.2019)

*Hinweis:* Sie benötigen auf diesem Übungsblatt die Wellenfunktionen von Elektronen in einem periodischen Potential, die sogenannten Blochfunktionen  $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ . Sie lassen sich als

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

ausdrücken, wobei  $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$  hier eine gitterperiodische Funktion mit Dimension  $L^{-3/2}$  ist. Die Bestimmung der Wellenfunktion reduziert sich damit auf die Bestimmung von  $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ .

#### Aufgabe 1 (Blochfunktionen) (3 Punkte)

Da es sich bei den Blochfunktionen um gitterperiodische Funktionen handelt, können diese durch eine Fouriertransformation in den reziproken Raum überführt werden. Es kann hilfreich sein, sie dann durch dimensionslose Koeffizienten  $C_{n\vec{k}}(\vec{G})$  auszudrücken,

$$u_{n\vec{k}}(\vec{G}) \equiv \frac{C_{n\vec{k}}(\vec{G})}{\sqrt{N\Omega}} \quad \text{mit} \quad \sum_{\vec{G}} |C_{n\vec{k}}(\vec{G})|^2 = 1.$$

$\Omega$  sei dabei das Volumen und  $N$  die Anzahl der Einheitszellen im betrachteten Kristall.

- a) Berechnen Sie mit Hilfe der angegebenen Relationen die Normierung der Blochzustände, zunächst pro Einheitszelle. Wie sind die oben definierten Blochzustände bezogen auf das gesamte Kristallvolumen normiert? Gehen Sie für die folgenden Überlegungen davon aus, dass der Spin nicht als Quantenzahl der Blochzustände berücksichtigt werden muss.  $E_F$  sei eine obere Grenze für die zu betrachtenden Energien. Die Elektronendichte pro Einheitszelle in Abhängigkeit der Blochfunktionen ist dann gegeben durch

$$\rho(\vec{r}) = 2 \sum_n \sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} \Theta(E_F - \epsilon_{n\vec{k}}) |\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})|^2.$$

- b)  $N_{\vec{k}}$  sei die Anzahl der erlaubten  $\vec{k}$ -Punkte in der Brillouin-Zone. Zeigen Sie, dass für die Anzahl der Elektronen folgender Ausdruck gilt:

$$N_e = \frac{2}{N_{\vec{k}}} \sum_n \sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} \Theta(E_F - \epsilon_{n\vec{k}}).$$

- c) Wie viele Elektronen sind pro Band erlaubt? Betrachten Sie der Einfachheit halber den Fall, dass alle relevanten Bandenergien unterhalb der Energie  $E_F$  liegen.

#### Aufgabe 2 (Freie Elektronen auf dem Quadratgitter) (3 Punkte)

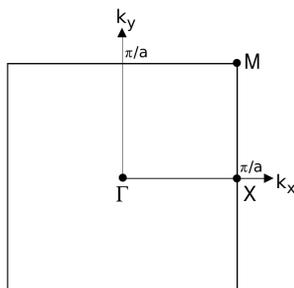
Zum besseren Verständnis von Darstellungen der elektronischen Bandstruktur skizzieren wir in dieser Aufgabe die Bandstruktur freier Elektronen auf einem Quadratgitter. Dabei werden wir sehen, dass

das Diagramm selbst in dieser einfachen Situation eine kompliziert wirkende Form annimmt. Die Dispersionsrelation lautet:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{q}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_0)^2$$

$\vec{k}$  ist auf die erste Brillouin-Zone beschränkt und  $\vec{G}_0$  ist ein reziproker Gittervektor des Quadratgitters. Skizzieren Sie nun die Dispersionsrelation entlang des Pfades  $\Gamma$ -M in der Brillouin-Zone (siehe unten) bis zu einer Energie  $\frac{5\hbar^2}{4ma^2}$ . Sie können dazu einen Computer verwenden.

(*Hinweis:* Sie müssen auch benachbarte Brillouin-Zonen mit  $\vec{G}_0 \neq 0$  berücksichtigen. In der Vorlesung werden Sie diese Situation mit Bändern höherer Energie identifizieren.)



### Aufgabe 3 (Schrödinger-Gleichung im periodischen Potential) (4 Punkte)

In der Vorlesung wurde eine allgemeine Prozedur zur Lösung der Schrödinger-Gleichung in einem periodischen Potential  $V(\vec{r})$  mit Fourierkoeffizienten  $V_{\vec{G}}$  angegeben. Die Fourierkoeffizienten  $u_{\vec{k}}$  der Bloch-Wellenfunktionen ergeben sich dabei als Lösung des folgenden Eigenwertproblems:

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_0)^2 - \epsilon \right) c_{\vec{k}-\vec{G}_0} + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}-\vec{G}_0} c_{\vec{k}-\vec{G}} = 0 \quad \text{mit} \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

Betrachten Sie nun einen eindimensionalen Kristall mit Gitterkonstante  $a$ . Das Potential sei durch  $V(\vec{r}) = 2V_0 \cos\frac{2\pi x}{a}$  gegeben. Das Eigenwertproblem kann dann wie folgt umformuliert werden:

$$\sum_G M_{G_0, G} c_{k-G} = \epsilon c_{k-G_0}$$

- Was ist die Struktur der Matrix M ?
- Schreiben Sie ein Programm, welches die Matrix M für  $k = 0$  diagonalisiert. Im Prinzip ist M unendlich groß. Sie können sich aber auf die zehn benachbarten Brillouin-Zonen in positiver und negativer Richtung beschränken, d.h.  $G_0 = \{-10\frac{2\pi}{a}, \dots, 10\frac{2\pi}{a}\}$ . Aus der Diagonalisierung erhalten Sie die Energieeigenwerte  $\epsilon$  und die Eigenfunktionen  $c_{k-G_0}$ . Berechnen Sie daraus die Bloch-Wellenfunktion des Bandes mit der niedrigsten Energie.
- Tragen Sie den Betrag der Wellenfunktion des Bandes mit niedrigster Energie in Abhängigkeit von  $x$  auf. Verwenden Sie folgende Parameter:  $V_0 = 100$ ,  $a = 1$ ,  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ . Für ein Potential dieser Stärke sind die Wellenfunktionen stark lokalisiert.