Theorie der Kondensierten Materie I WS 2017/2018

Prof. Dr. A. Mirlin, PD Dr. I. Gornyi

Dr. N. Kainaris, Dr. S. Rex, J. Klier

Blatt 3

Besprechung: 09.11.2017

---

1. Elektronen in 1D periodischem Potential: $(10 + 15 + 15 = 40$ Punkte)

Wir betrachten Elektronen in einem eindimensionalen periodischen Potential der Form

$$V(x) = V_0 \cos^2(\pi x/a)$$

mit Gitterkonstante a. Der Hamiltonian lautet

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Verwenden Sie den Ansatz der Bloch-Funktionen

$$\psi_{n,k}(x) = u_{n,k}(x)\exp(ikx) \quad \text{mit} \quad u_{n,k}(x+a) = u_{n,k}(x)$$

um das Energiespektrum $E_{n,k}$ zu analysieren.

(a) Starten Sie von der Schrödinger-Gleichung

$$H\psi_{n,k}(x) = E_{n,k}\psi_{n,k}(x)\,,$$

benutzen Sie die Periodizität von $u_{n,k}(x)$ und leiten Sie eine Matrix-Eigenwertgleichung für die Energien $E_{n,k}$ her. Zeigen Sie, dass die Eigenwerte die Relation $E_{n,k+G_l} = E_{n,k}$ mit $G_l = 2\pi l/a$ erfüllen.

(b) Wir beschränken uns in dieser Teilaufgabe auf $n \in \{-1, 0, 1\}$ so dass wir nur 3×3 Matrizen diagonalisieren müssen. Bestimmen Sie das Spektrum, d.h. die drei Energieeigenwerte $E_{n,k}$ mit $n \in \{-1, 0, 1\}$, als Funktion von V_0 für

$$k = \left\{0, \pm\frac{\pi}{3a}, \pm\frac{2\pi}{3a}, \pm\frac{\pi}{a}\right\}.$$

(c) Analysieren Sie nun die vollständige Bandstruktur in der Näherung fast freier Elektronen.

2. Wannier-Funktionen: (10 Punkte)

Betrachten Sie Wannier-Funktionen

$$w_n(\vec{r}) = V_{\mathrm{EZ}} \int_{1.\mathrm{BZ}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}),$$

wobei $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ Bloch-Zustände sind und V_{EZ} das Volumen der Einheitszelle bezeichnet.

Überprüfen Sie, dass Wannier-Funktionen $w_n(\vec{r}-\vec{R}),\ n = 1, 2, \ldots,\ \vec{R} \in$ Bravais-Gitter, ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) bilden:

$$\int d^3r\, w_n^*(\vec{r}-\vec{R})w_{n'}(\vec{r}-\vec{R}') = V_{\mathrm{EZ}}\delta_{nn'}\delta_{\vec{R}\vec{R}'}\,,$$

$$\sum_{n,\vec{R}} w_n^*(\vec{r}-\vec{R})w_n(\vec{r}'-\vec{R}) = V_{\mathrm{EZ}}\delta(\vec{r}-\vec{r}').$$