

Solutions to Free electron exercise

March 3, 2020

2 Hamilton-Operator in Bloch-Darstellung

Wir betrachten den Hamilton-Operator in Bloch-Darstellung

$$H_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2}{2m} + V(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \equiv (\mathbf{H}(\mathbf{k}))_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}.$$

Wir berechnen den Operator der sich ergibt, wenn statt \mathbf{k} , $\mathbf{k} + \mathbf{G}''$ betrachtet wird:

$$H_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{k} + \mathbf{G}'') = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{G}'' + \mathbf{G})^2}{2m} + V(\mathbf{G} - \mathbf{G}').$$

Wir betrachten die Matrix, deren Zeilen und Spalten um \mathbf{G}'' verschoben sind:

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{G}-\mathbf{G}''\mathbf{G}'-\mathbf{G}''}(\mathbf{k} + \mathbf{G}'') &= \delta_{\mathbf{G}-\mathbf{G}''\mathbf{G}'-\mathbf{G}''} \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{G}'' + \mathbf{G} - \mathbf{G}'')^2}{2m} + V(\mathbf{G} - \mathbf{G}'' - \mathbf{G}' + \mathbf{G}'') \\ &= \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2}{2m} + V(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \end{aligned}$$

und finden, dass diese Spalten/Zeilen gleich den ursprünglichen Spalten/Zeilen des unverschobenen Operators gleichen. Zeilen/Spalten-Vertauschung ändern jedoch die Eigenwerte nicht, was zu zeigen war. Der Grund für die Invarianz ist darin zu finden, dass das Potential nur von Differenzen von \mathbf{G} und \mathbf{G}' abhängt.

3 Kosinuspotential

Das Potential ist durch

$$V(x) = v_0 \cos(2\pi \frac{x}{a})$$

gegeben.

a)

Das Potential lässt sich auch als Exponentialfunktion schreiben:

$$V(x) = \frac{v_0}{2} (e^{i2\pi \frac{x}{a}} + e^{-i2\pi \frac{x}{a}}).$$

Wir können direkt ohne Rechnung zwei nicht verschwindende Fourierkoeffizienten identifizieren: $\frac{v_0}{2}$ für die Gittervektoren $G_a = \pm \frac{2\pi}{a}$

$$V(G) = V_{\pm \frac{2\pi}{a}} = \frac{v_0}{2}$$

b)

Wir schreiben die Matrix aus Aufgabe 1 hier explizit für $G = 0, \pm \frac{2\pi}{a}$ auf (und erinnern uns daran, dass diese Matrix eigentlich unendlich dimensional ist für weitere G .):

$$H(k) = \begin{pmatrix} \hbar^2 \left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2 / 2m & v_0/2 & 0 \\ v_0/2 & \hbar^2 k^2 / 2m & v_0/2 \\ 0 & v_0/2 & \hbar^2 \left(k + \frac{2\pi}{a}\right)^2 / 2m \end{pmatrix}.$$

c)

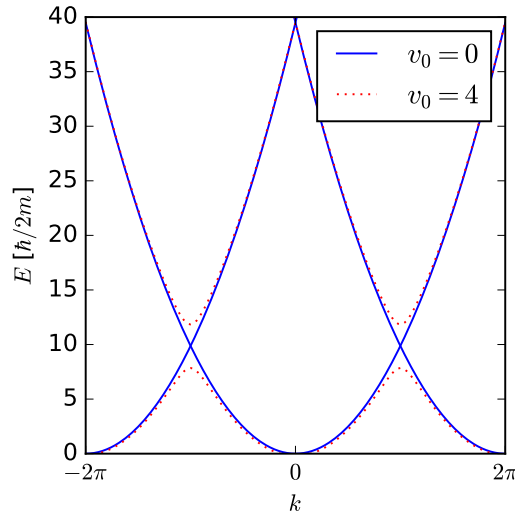


Figure 1: Skizze der Bandstruktur: In blau ist die Dispersion für $v_0 = 0$, in gestricheltem rot die Dispersion für $v_0 = 4$. Offensichtlich ergibt sich an den Kreuzungspunkten eine Hebung der Entartung.

Skizze: Siehe Abb. 1. Um die Bandlücke am Zonenrand zu bestimmen, berechnen wir das Spektrum bei $k = \frac{\pi}{a}$. Da sind in der Matrix nur die Spalten/Zeilen zu $G = 0$ und $G = -\frac{2\pi}{a}$ relevant. Wir können diese Submatrix dann diagonalisieren und erhalten:

$$\begin{vmatrix} \hbar^2(\pi/a)^2/2m - \varepsilon & v_0/2 \\ v_0/2 & \hbar^2(\pi/a)^2/2m - \varepsilon \end{vmatrix} = \left(\hbar^2\pi^2/(a^2 2m) - \varepsilon\right)^2 - v_0^2/4 = 0$$

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} \pm v_0/2$$

Die Bandlücke beträgt daher v_0 .

d)

Die Näherung kleiner v_0 bricht zusammen, wenn die kinetische Energie nicht mehr als groß gegenüber dem Potential angesehen werden kann: $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} \sim v_0$

4 Graphen

Die Gittervektoren des reziproken Gitters lauten

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } \mathbf{G}_2 = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\pi}{3}) \\ \sin(\frac{\pi}{3}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.5 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}.$$

Es sollen nur die niedrigsten Fourierkomponenten ungleich Null sein:

$$V_{\pm\mathbf{G}_1} = V_{\pm\mathbf{G}_2} = V_{\pm\mathbf{G}_2 \mp \mathbf{G}_1} = V.$$

a)

Siehe Abb. 2.

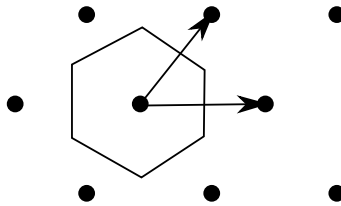


Figure 2: Gitter BZ des hexagonalen Gitters.

b)

Betrachte $\mathbf{K}_0 = 1/3\mathbf{G}_1 + 1/3\mathbf{G}_2$:

$$\mathbf{K}_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} \end{pmatrix}.$$

Es ist $\mathbf{K}_0^2 = 1/3$. Weiterhin findet man $\mathbf{G}_a = \mathbf{G}_1$ und $\mathbf{G}_b = \mathbf{G}_2$, was leicht nachzurechnen ist. Das bedeutet, dass wir für $V = 0$ eine dreifache Bandentartung finden (Betrachte Hamilton-Operator in Aufgabe 1).

c)

$$H_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} (\mathbf{k})^2 & V & V \\ V & (\mathbf{k} - \mathbf{G}_1)^2 & V \\ V & V & (\mathbf{k} - \mathbf{G}_2)^2 \end{pmatrix},$$

d)

Wählen wir den Energie-Nullpunkt so, dass die Diagonale der Matrix Null ist finden wir folgende Matrix:

$$H_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{K}_0) = \begin{pmatrix} 0 & V & V \\ V & 0 & V \\ V & V & 0 \end{pmatrix},$$

deren Eigenwerte wir durch das Lösen des charakteristischen Polynoms, $\varepsilon(3V^2 - \varepsilon^2) = -2V^3$, zu

$$\varepsilon_{\mathbf{K}_0} = 2V, -V, -V$$

bestimmen.

e)

Ausgehend vom Ausdruck in Teil c) schreiben wir

$$\begin{aligned}
 H_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} (\mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{k})^2 & V & V \\ V & (\mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{k} - \mathbf{G}_1)^2 & V \\ V & V & (\mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{k} - \mathbf{G}_2)^2 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{K}_0^2 + \delta\mathbf{k}^2 + \delta\mathbf{k}\mathbf{K}_0 & V & V \\ V & (\mathbf{K}_0 - \mathbf{G}_1)^2 + \delta\mathbf{k}^2 + \delta\mathbf{k}(\mathbf{K}_0 - \mathbf{G}_1) & V \\ V & V & (\mathbf{K}_0 - \mathbf{G}_2)^2 + \delta\mathbf{k}^2 + \delta\mathbf{k}(\mathbf{K}_0 - \mathbf{G}_2) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Was wir durch die Wahl des Energie Nullpunkts ($\mathbf{K}_0^2 + \delta\mathbf{k}^2 = 0$) und des Ergebnisses aus Teil b) folgendermaßen vereinfachen:

$$H_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \delta\mathbf{k}\mathbf{K}_0 & V & V \\ V & \delta\mathbf{k}(\mathbf{K}_0 - \mathbf{G}_1) & V \\ V & V & \delta\mathbf{k}(\mathbf{K}_0 - \mathbf{G}_2) \end{pmatrix}$$

Für einen plot siehe Abb. 3.

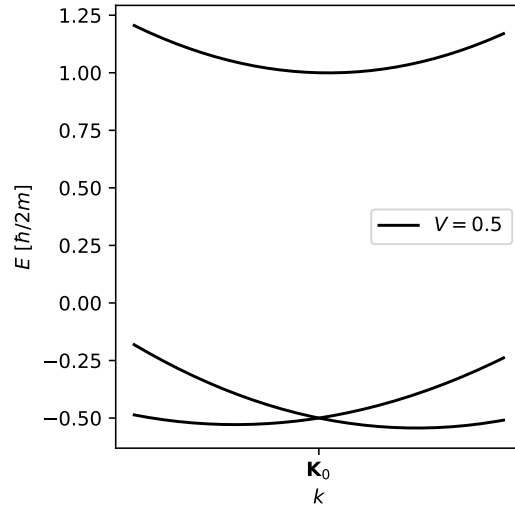


Figure 3: Plot der Dispersion um \mathbf{K}_0 . Zu erkennen ist die lineare Dispersion um den Diracpunkt.