Aufgabe 9: Hellmann-Feynman-Theorem (1,5 Punkte)

Diese Aufgabe dient als Vorbereitung für die nachfolgende Übungsaufgabe.

Gegeben sei ein hermitescher Operator $\hat{H}(\lambda)$, der von dem Parameter λ abhängt. $\hat{H}(\lambda)$ erfüllt die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}(\lambda)\,\varphi_{n,\lambda}(\vec{r}) = E_n(\lambda)\,\varphi_{n,\lambda}(\vec{r})$$

mit

$$\int \varphi^*_{n,\lambda}(\vec{r})\,\varphi_{n',\lambda}(\vec{r})\,d^3 r = \delta_{n,n'} \,.$$

$E_n(\lambda)$ und $\varphi_{n,\lambda}(\vec{r})$ hängen dabei parametrisch von λ ab.

Zeigen Sie, dass

$$\frac{\partial}{\partial\lambda} E_n(\lambda) = \int \varphi^*_{n,\lambda}(\vec{r}) \left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\hat{H}(\lambda)\right) \varphi_{n,\lambda}(\vec{r})\,d^3 r$$

gilt.

Aufgabe 10: Impuls eines Blochelektrons (2,5 Punkte)

Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\,\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}}\,\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

mit

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2\,m} + V(\vec{r}) \qquad \text{und} \qquad V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$$

lassen sich in der Form

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

darstellen. Dabei ist $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ eine gitterperiodische Funktion.

a) Zeigen Sie, dass

$$\hat{\vec{p}}\,\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\,\vec{r}} \left(\hbar\,\vec{k} + \hat{\vec{p}}\right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

gilt und dass $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ die Eigenwertgleichung

$$\hat{\tilde{H}}(\vec{k})\,u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}}\,u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

mit

$$\hat{\tilde{H}}(\vec{k}) = \frac{1}{2\,m}\left(\hbar\,\vec{k} + \hat{\vec{p}}\right)^2 + V(\vec{r})$$

erfüllt.

b) Stellen Sie den Erwartungswert des Impulsoperators

$$\langle \hat{\vec{p}} \rangle = \int \psi^*_{n,\vec{k}}(\vec{r})\, \hat{\vec{p}}\, \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})\, d^3 r$$

durch ein Integral über $u^*_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ und $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ dar.

c) $\hat{\hat{H}}(\vec{k})$ und $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ hängen parametrisch von $\vec{k}$ ab. Berechnen Sie unter Beachtung des Hellmann-Feynman-Theorems die Ableitung

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n,\vec{k}} = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \int u^*_{n,\vec{k}}(\vec{r})\, \hat{\hat{H}}(\vec{k})\, u_{n,\vec{k}}(\vec{r})\, d^3 r$$

mit

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} = \left(\frac{\partial}{\partial k_x}, \frac{\partial}{\partial k_y}, \frac{\partial}{\partial k_z} \right) .$$

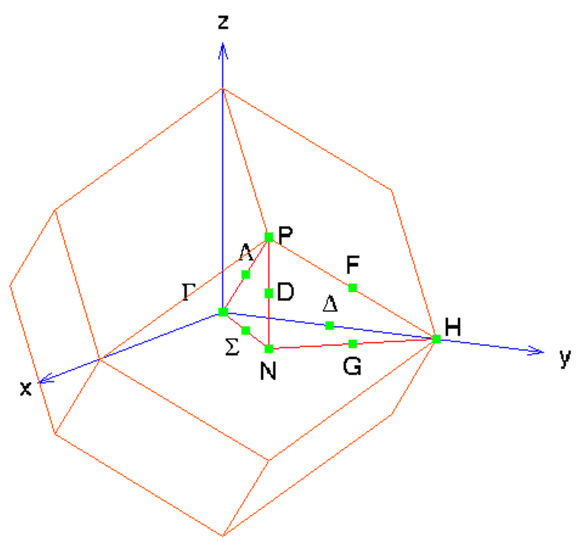
Wie hängt $\nabla_{\vec{k}} E_{n,\vec{k}}$ mit dem Erwartungswert $\langle \hat{\vec{p}} \rangle$ zusammen?

Aufgabe 11: Bandstruktur von Na **(6 Punkte)**

Natrium kristallisiert in einer bcc-Struktur mit einer Gitterkonstanten von $a = 4{,}23\,\text{Å}$. Das Festkörperpotential sei eine Überlagerung von atomaren Potentialen, die durch Gaußfunktionen dargestellt werden:

$$V(\vec{r}) = V_0 \left(\left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{3/2} \frac{1}{\Omega_0} - \sum_l e^{-\gamma(\vec{r}-\vec{R}_l)^2} \right) .$$

Dabei ist Ω_0 das Volumen der Elementarzelle. Die Summe der Gittervektoren $\vec{R}_l$ erstreckt sich über den gesamten $\mathbb{R}^3$.



Die Bandstruktur des Kristalls soll entlang der Hochsymmetrielinien Λ, Σ und D (siehe Abbildung) von

$$P \left(\vec{k} = \frac{\pi}{a}(1,\, 1,\, 1) \right)$$

über

$$\Gamma \left(\vec{k} = (0,\, 0,\, 0) \right)$$

nach

$$N \left(\vec{k} = \frac{\pi}{a}(0,\, 1,\, 1) \right)$$

und wieder nach P berechnet werden. Dabei soll eine Entwicklung der Wellenfunktion nach ebenen Wellen verwendet werden.

a) Bestimmen Sie die reziproken Gittervektoren $\vec{b}_j$ des bcc-Kristalls.

b) Benutzen Sie zwei ebene Wellen mit $\vec{G}_1 = (0,\,0,0)$ und $\vec{G}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,\,-1,\,-1)$, um die Bandstruktur zu berechnen. Geben Sie die resultierende Hamiltonmatrix $H_{\vec{G}_j,\vec{G}_{j'}}$ an. Zeichnen Sie zunächst die Bandstruktur für $V_0 = 0$ eV. Zeichnen Sie dann die Bandstruktur für $V_0 = 30$ eV und $\gamma = 0,2\,\frac{1}{\mathring{A}^2}$. Wie groß ist die Aufspaltung $\Delta\,E$ der Bänder am N-Punkt?

c) *Für alle, die noch nicht genug haben:* Falls Sie eine genauere Berechnung der Bandstruktur durchführen möchten, so müssen Sie *alle* Gittervektoren mit $|\vec{G}_j| \leq \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$ bei der Entwicklung der Wellenfunktion benutzen. Diagonalisieren Sie die zugehörige Hamiltonmatrix numerisch und zeichnen Sie die entsprechende Bandstruktur.

Hinweise:

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{e}^{-\gamma\,r^2}\,\mathrm{e}^{i\,\vec{G}\,\vec{r}}\,d^3\,r \;=\; \left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{3/2}\,\mathrm{e}^{-\frac{|\vec{G}|^2}{4\,\gamma}}$$

$$\frac{\hbar^2}{2\,m} \;=\; 3{,}80998\ \mathrm{eV}\,\cdot\,\mathring{A}^2\ .$$