Theoretische Festkörperphysik

Prof. F. Wegner, Universität Heidelberg, WS 03/04

5. Übungsblatt

9) In einem hexagonalen Gitter mit Gitterkonstante a und $g = 4\pi/(3a)$, vgl. Aufgabe 7, unterscheiden sich die Vektoren $\mathbf{g}_1 = g(1,0,0)$, $\mathbf{g}_2 = g(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$, $\mathbf{g}_3 = g(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$ um reziproke Gittervektoren. Das Gleiche gilt dann auch für die Vektoren $\mathbf{k}_i = \mathbf{g}_i + \delta\mathbf{k} = \mathbf{g}_i + k_z\mathbf{e}_z + \mathbf{k}_\perp$, i=1,2,3. Dabei soll $\mathbf{k}_\perp$ in der xy-Ebene liegen. Für $\mathbf{k}_\perp = 0$ ist die kinetische Energie $\epsilon_i^{\rm kin}$ dieser Zustände entartet. Die zu diagonalisierende Matrix hat die Form

$$H = \begin{pmatrix} V_0 + \epsilon_1^{\rm kin} & V_1 & V_1 \\ V_1 & V_0 + \epsilon_2^{\rm kin} & V_1 \\ V_1 & V_1 & V_0 + \epsilon_3^{\rm kin} \end{pmatrix}.$$

a) Man bestimme die Eigenenergien ϵ für diesen speziellen Fall.

b) Zwei der Eigenwerte sind entartet. Man bestimme zwei zugehörige orthonormierte Eigenzustände $|1>$ und $|2>$. Dann bestimme man die zugehörigen Matrixelemente $< i|H|j >$ für $k_\perp \neq 0$ und die zugehörigen Energie-Eigenwerte.

Statt der Aufgabe 9b kann man die folgende bearbeiten:

10) In einem orthorombischen Gitter (drei ungleiche Achsen, die senkrecht aufeinander stehen) betrachtet man das analoge Problem, das heißt die Vektoren $\mathbf{g}_{\sigma\tau} = (\sigma g_1, \tau g_2, 0)$, $\sigma, \tau = \pm 1$ unterscheiden sich um reziproke Gittervektoren. Für $\mathbf{k}_{\sigma\tau} = \mathbf{g}_{\sigma\tau} + k_z\mathbf{e}_z$ hat man Entartung. Betrachten wir der Reihe nach $\mathbf{k}_{++}$, $\mathbf{k}_{+-}$, $\mathbf{k}_{-+}$ und $\mathbf{k}_{--}$, so erhält man die Matrix

$$\begin{pmatrix} V_{00} + \epsilon^{\rm kin} & V_{01} & V_{10} & V_{11} \\ V_{01} & V_{00} + \epsilon^{\rm kin} & V_{11} & V_{10} \\ V_{10} & V_{11} & V_{00} + \epsilon^{\rm kin} & V_{01} \\ V_{11} & V_{10} & V_{01} & V_{00} + \epsilon^{\rm kin} \end{pmatrix}.$$

a) Man bestimme die Energieeigenwerte. Tritt eine Entartung auf? (Hinweis: Alle Komponenten der Eigenvektoren stimmen bis auf das Vorzeichen überein.)

b) Im tetragonalen Gitter wird $V_{10} = V_{01}$. Wie steht dann es mit der Entartung?