

Übungen zur Computational Physics

Aufgabe 5 — Dispersion fast freier Elektronen am Zonenrand

Betrachten Sie die Bandstruktur eines eindimensionalen Festkörpers mit Gitterkonstante a , und berechnen Sie die Aufspaltung der entarteten freien Bänder ($V(x) \equiv 0$) am Zonenrand $k = \pi/a$ mittels entarteter Störungstheorie erster Ordnung in den Fourier-Koeffizienten V_G des Potenzials!

Zeigen Sie, dass eine Energielücke der Größe $\Delta E = 2|V_1|$ entsteht!

Aufgabe 6 — Löwdin-Transformation

Gegeben ist das generalisierte Eigenwertproblem

$$\mathbf{H}\mathbf{u} = \varepsilon\mathbf{S}\mathbf{u}$$

mit der Hamilton-Matrix \mathbf{H} und der Überlappmatrix \mathbf{S} .

Wie sind \mathbf{H} und \mathbf{S} definiert? Zeigen Sie, dass \mathbf{H} hermitesch und \mathbf{S} hermitesch und positiv definit ist!

Die Löwdin-Transformation ist durch

$$\mathbf{u}' = \mathbf{S}^{1/2}\mathbf{u}$$

definiert.

Zeigen Sie, dass sich damit das generalisierte auf ein gewöhnliches Eigenwertproblem zurückführen lässt! Wie kann man numerisch die Löwdin-Transformierte bestimmen?