

Übungen zur Einführung in die Gruppentheorie

13. Übung am 23. Januar 2002

U22) Kommutatoren

Es bezeichne $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{t}}$ den Translationsoperator für eine Translation \mathbf{t} , $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{n}, \phi)$ sei der Operator für eine Drehung um die Achse \mathbf{n} mit Winkel ϕ , und $\hat{\pi}$ sei der Paritätsoperator (d.h., der Operator für eine räumliche Inversion).

Welche der folgenden Paare von Operatoren kommutieren?

- a) $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{t}}$ und $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{t}'}$ (wobei $\mathbf{t} \nparallel \mathbf{t}'$).
- b) $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{n}, \phi)$ und $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{n}', \phi')$ (wobei $\mathbf{n} \nparallel \mathbf{n}'$).
- c) $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{t}}$ und $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{n}, \phi)$.
- d) $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{t}}$ und $\hat{\pi}$.
- e) $\hat{\mathcal{D}}(\mathbf{n}, \phi)$ und $\hat{\pi}$.

U23) Die Tight-Binding-Näherung

Wir betrachten eine lineare Kette von Atomen mit Abstand a . Für dieses System wollen wir eine symmetrieangepaßte Näherungslösung entwickeln. Unter der Annahme, daß die Atome nur schwach miteinander wechselwirken, können wir die Eigenzustände der Kette nach den Eigenzuständen der isolierten Atome entwickeln. Es sei also $|n\rangle$ der Eigenzustand (= „Orbital“) des isolierten n -ten Atoms mit Energie-Eigenwert E_0 . Ist $\hat{\mathcal{T}}_a$ der Translationsoperator für eine Translation a , so gilt

$$\hat{\mathcal{T}}_a |n\rangle = |n+1\rangle.$$

- a) Konstruieren Sie aus den Zuständen $|n\rangle$ symmetrieangepaßte Bloch-Zustände. Prüfen Sie nach, daß die von Ihnen konstruierten Zustände das Bloch-Theorem erfüllen.

Die Tight-Binding-Näherung besagt nun, daß die Zustände $|n\rangle$ auch *fast* Eigenzustände des vollen Hamiltonians \hat{H} der linearen Kette sind,

$$\hat{H} |n\rangle = E_0 |n\rangle - \Delta |n-1\rangle - \Delta |n+1\rangle,$$

das heißt, durch die Wirkung von \hat{H} werden dem beim n -ten Atom lokalisierten Zustand $|n\rangle$ die Orbitale der benachbarten Atome $n \pm 1$ beigemischt („*Nearest-Neighbour Tight binding*“).

- b) Zeigen Sie, daß die von Ihnen konstruierten Bloch-Zustände Eigenzustände von \hat{H} sind. Welche Werte haben die zugehörigen Energie-Eigenwerte?
- c) Interpretieren Sie Ihr Ergebnis. Betrachten Sie insbesondere den Grenzwert $\Delta \rightarrow 0$.