Übungsblatt 8

Ausgabe 8.06.2015, Abgabe: 15.06.2015, 10:15 Uhr (vor der Vorlesung), Hörsaal AP

Übungsgruppe: Teilnehmer 1:

Gruppenleiter: Teilnehmer 2:

Aufgabe	17	18	19	Σ
mögliche Punkte	6	2	2	10
erreichte Punkte				

Aufgabe 17: Dispersionsrelation im Modell für stark gebundene Elektronen

Die Dispersionsrelation für Elektronen in einem kubisch flächenzentrierten Gitter lautet im Modell stark gebundener Elektronen näherungsweise

$$E(k) = E_\alpha^{'} - 4|A|\left(\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2} + \cos\frac{k_y a}{2}\cos\frac{k_z a}{2} + \cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}\right)$$

mit der Gitterkonstanten a, dem Austauschintegral A und der Energie $E_\alpha^{'}$, die sich überwiegend aus der Energie des atomaren Niveaus α ergibt.

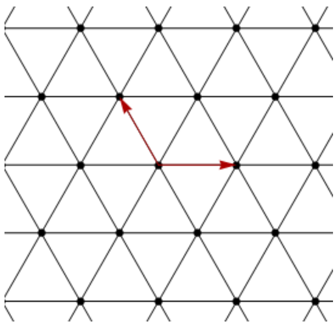
a) Welche Bedeutung hat das Austauschintegral?

b) Berechnen und zeichnen Sie die Dispersion in der ersten Brillouin-Zone jeweils für die Γ X- und die Γ L-Richtung. Wie groß ist sind jeweils die Bandbreiten?

c) Zeigen Sie, dass im Modell für stark gebundene Elektronen das unterste Band eines zweidimensionalen Gitters mit hexagonaler Symmetrie in der Näherung stark gebundener Elektronen durch folgenden Ansatz beschrieben werden kann:

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \mathcal{E}'_\alpha - 2A\left[\cos(k_x a) + 2\cos\left(\frac{k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right)\right]$$

wobei a der Abstand der Atome im hexagonalen Gitter ist und das Koordinatensystem so orientiert sein soll, dass eine der beiden elementaren Translationen in x-Richtung weist (s. Abb.).



Punkte: 1+3+2 = 6

Aufgabe 18: Wellenfunktion im Modell für stark gebundene Elektronen

Das Modell stark gebundener Elektronen basiert auf folgendem in der Vorlesung diskutierten Ansatz für die Wellenfunktion der Kristallelektronen:

$$\Psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\mathbf{R}_l} e^{i\vec{\mathbf{k}}\vec{\mathbf{R}}_l}\,\Phi(\vec{\mathbf{r}}-\vec{\mathbf{R}}_l) \quad .$$

Zeigen Sie, dass dieser Ansatz folgende Eigenschaften von Blochfunktionen besitzt:

(a) für alle Gittervektoren $\vec{\mathbf{R}}$ gilt $\Psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}}+\vec{\mathbf{R}}) = e^{i\,\vec{\mathbf{k}}\vec{\mathbf{R}}}\,\Psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}})$;

(b) für alle Vektoren $\vec{\mathbf{G}}$ des reziproken Gitters gilt $\Psi_{n,\vec{\mathbf{k}}+\vec{\mathbf{G}}}(\vec{\mathbf{r}}) = \Psi_{n,\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}})$.

Punkte: 1+1 = 2

Aufgabe 19: Brillouinzonen

a) Konstruieren Sie graphisch die ersten vier Brillouinzonen eines zweidimensionalen quadratischen Gitters mit der Gitterkonstanten *a*.

b) Auf welche Weise kann man die Teile der *n*-ten (*n* = 2 - 4) durch Translation in die erste Brillouinzone übertragen (reduziertes Zonenschema)? Zeigen Sie durch Zeichnung des Ergebnisses für *n*=4, dass sich alle Teilflächen zur Fläche der 1. BZ aufsummieren!

Punkte: 1+1 = 2