Übungsblatt 9

Abgabe bearbeiteter Übungszettel bis Freitag, 8. Dezember, 12 Uhr!

Aufgabe 1: Bandüberlappung

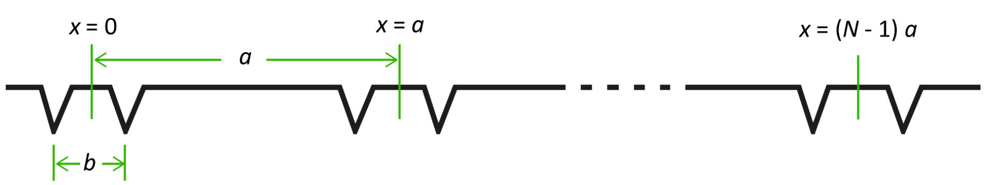
Zeigen Sie, dass für ein eindimensionales System keine Bandüberlappung auftreten kann!

Aufgabe 2: Eindimensionaler Festkörper

Betrachten Sie einen eindimensionalen Festkörper der Länge $L = Na$, der durch N diatomare Moleküle aufgebaut ist. Der interatomare Abstand innerhalb eines Moleküls beträgt b mit $b < a/2$. Die Zentren benachbarter Moleküle liegen um a auseinander. Die potentielle Energie sei durch die Summe von δ-Funktionen, welche im Zentrum eines jeden Atoms liegen, gegeben:

$$V = -A \sum_{n=0}^{N-1} \left[\delta\left(x - na + \frac{b}{2}\right) + \delta\left(x - na - \frac{b}{2}\right)\right].$$

A ist positiv und $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$. Das Potential ist nachfolgend abgebildet.



a) Betrachten Sie freie Elektronen in dem Festkörper (d.h. vernachlässigen Sie V) und periodische Randbedingungen. Bestimmen Sie die erlaubten Werte des Elektronenvektors $\boldsymbol{k}$ und normalisieren Sie die Wellenfunktion!
b) Nun unter Beachtung des Potentials V, das in einer Fourier-Reihe $V = \sum_q V_q \exp(iqx)$ ausgedrückt werden soll: Bestimmen Sie die erlaubten Werte von q und die Koeffizienten V_q!
c) Zeigen Sie für ein kleines A, dass für bestimmte Werte von k Energielücken existieren! Leiten Sie eine allgemeine Gleichung für die Energielücken her und zeigen Sie insbesondere, dass die Energielücke am Rand der ersten Brillouin-Zone proportional zu $\cos(\pi b/a)$ ist!
d) Bestimmen Sie die Zahl der Zustände in der ersten Brillouin-Zone!
e) Nehmen Sie $b = a/2$ an. Diskutieren Sie hierfür die Auswirkungen auf die zuvor bestimmten Resultate!

Aufgabe 3: 3D-System stark gebundener Elektronen

Die Bandstruktur des vereinfachten tight-binding-Modells hat die Form

$$E(\boldsymbol{k}) = E_0 - t\ \textstyle\sum_j \exp\left(i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}_j\right).$$

Die Summe läuft über die Vektoren des Gitters, die den Ursprung mit seinen nächsten Nachbarn verbinden. Der Parameter t ist das Überlappungsintegral, das für alle nächsten Nachbarn den gleichen Wert annimmt.

a) Berechnen Sie $E(\boldsymbol{k})$ für ein fcc-Gitter!

b) In der Nähe des Γ-Punktes kann man $E(\boldsymbol{k})$ nach $\boldsymbol{k}$ Taylor-entwickeln. Dadurch erhält man einen Zusammenhang mit dem Spektrum freier Elektronen der effektiven Masse m^*. Wie hängt die effektive Masse von t und der Gitterkonstanten a ab?

c) Wie groß muss t für $a = 0.3\ \mathrm{nm}$ sein, damit die effektive Masse der Masse von freien Elektronen entspricht?

d) Für ein orthorhombisches Gitter ergibt eine tight-binding-Rechnung die Bandstruktur $E(\boldsymbol{k}) = E_0 - 2\left[t_a \cos(k_x a) + t_b \cos\left(k_y b\right) + t_c \cos(k_z c)\right]$. Die Längen a, b und c stellen die Abmessungen der Einheitszelle dar. Berechnen Sie die Komponenten des Vektors der Gruppengeschwindigkeit! Zeigen Sie außerdem, dass der Tensor der effektiven Masse für alle Vektoren k diagonal ist, und diskutieren Sie den Spezialfall, dass k in einer Umgebung des Γ-Punktes der Brillouin-Zone liegt!