

**9. Übung (Abgabe Di. 9. Januar 2007 zu Beginn der Übung bzw. Vorlesung)**

---

**33. Energiebänder im primitiv kubischen System**

Im Rahmen der Näherung des leeren Gitters ( $U(x) \rightarrow 0$ ) ergeben sich in der ersten Brillouin-Zone für eine parabelförmige Energie-Relation  $E(\vec{k}) = (\hbar^2/2m)k^2$  des fast freien Elektronengases in einem primitiven kubischen Gitter (Gitterkonstante  $a$ ) aufgrund der Periodizität unendlich viele Energiebänder (siehe Folien 17, Blatt 1). Bestimmen Sie die explizite Energieabhängigkeit  $E(k_x)$  entlang der  $k_x$ -Achse in der ersten Brillouin-Zone für diejenigen Energie-Parabeln, die ihr Minimum bei folgenden reziproken Gittervektoren haben:  $\vec{G} = [111]$ ,  $[200]$ ,  $[020]$  und  $[112]$ .

(2 Punkte)

**34. Energiebänder im fcc System (zeitaufwändig!)**

Bestimmen Sie im Rahmen der gleichen Näherung wie in Aufg. 33 die explizite Energierelation im fcc-Gitter mit kubischer Gitterkonstante  $a$  (siehe Folien 17, Blatt 2) für jeweils das energetische tiefste Band entlang der Richtung  $\Gamma$ -X-, X-W-, W-L- und L- $\Gamma$ -Richtung.

*Hinweis: Berechnen Sie zuerst die  $k$ -Vektoren, die im reziproken Raum auf die Punkte X, W und L zeigen [ $\Gamma$  ist der Punkt  $(0,0,0)$ ]. Parametrisieren Sie nun die Gerade, die von Punkt 1 (z.B.  $\Gamma$ ) zum Punkt 2 (z.B. X) läuft, mit  $t \in [0,1]$ , um z.B. die  $\Gamma$ -X-Richtung zu erhalten. Die dargestellte Energie-Kurve ist dann die Energie des fast freien Elektronengases entlang dieser parametrisierten Kurve.*

(2 Punkte)

**35. Näherungslösung für die Energielücke an der Zonengrenze**

Am Rand der Brillouin-Zonen entsteht aufgrund des periodischen Potentials eine Energielücke. Es sei das Potential gegeben durch  $U(x) = \sum_G U_G e^{iGx}$  mit  $U_G \ll E_{\vec{k}}$ . Man betrachte in der Fourier-

Entwicklung der Wellenfunktion  $\psi_{\vec{k}}(x) = \sum_G C(\vec{k} - \vec{G}) e^{i(\vec{k} - \vec{G})x}$  nur die beiden dominanten Glieder

$C(\pm\frac{1}{2}G)$ , die restlichen Glieder seien zu vernachlässigen. Zeigen Sie, indem Sie das lineare Gleichungssystem der Schrödinger-Gleichung im Impulsraum lösen, dass die Energielücke dann gegeben ist durch  $E_g = 2U_G$ .

(2 Punkte)

**36. Brillouin-Zonen in 2-D**

Bestimmen und zeichnen Sie die ersten vier Brillouin-Zonen im zweidimensionalen hexagonalen Gitter. Zeigen Sie, wie sich diese auf die 1. Brillouin-Zone zurückfalten lassen, indem Sie die entsprechenden Teilstücke in der 1. B.Z. einzeichnen.

(2 Punkte)

Ich wünsche Ihnen allen

Frohe Weihnachten und einen guten Rutsch ins neue Jahr!