Heiko Dumlich 8. Januar 2007

9 Übungsblatt Festkörperphysik

9.1 (Energiebänder im primitiv kubischen System)

Es ist die explizite Energieabhängigkeit $E(k_x)$ entlang der k_x-Achse in der ersten Brillouin-Zone für diejenigen Energie-Parablen zu bestimmen, die ihr Minimum bei folgenden reziproken Gittervektoren haben: $\vec{G} = [111], [200], [020]$ und $[112]$. Es gilt $E\left(\vec{k}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$ im Rahmen der Näherung des leeren Gitters. Nun müssen wir noch beachten, dass die Minima um $\vec{G}$ verschoben sind, es gilt also, wenn wir auf die erste Brillouin-Zone projizieren/abbilden:

$$E\left(\vec{k}'\right) = \frac{\hbar^2}{2m}{}^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{k} + \vec{G}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left((k_x + G_x)^2 + (k_y + G_y)^2 + (k_z + G_z)^2\right)$$

wobei $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$. Nun können wir explizit einsetzen, wenn wir entlang der k_x-Achse die Energieabhängigkeit betrachten, ergibt sich also:

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left((k_x + G_x)^2 + {}^2 + {}^2\right)$$

Nun müssen wir nur noch einsetzen, wobei $G = \frac{2\pi}{a}$. Somit ergibt sich also explizit für die gegebenen $\vec{G}$'s:

$$\begin{aligned}
[111]: \quad E(k_x) &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(k_x + \frac{2\pi}{a}\right)^2 + 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\right) \\
[200]: \quad E(k_x) &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x + 2\frac{2\pi}{a}\right)^2 \\
[020]: \quad E(k_x) &= \frac{\hbar^2}{2m}\left({}^2 + 2\frac{2\pi}{a}\right) \\
[112]: \quad E(k_x) &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(k_x + \frac{2\pi}{a}\right)^2 + 5\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\right)
\end{aligned}$$

9.2 (Energiebänder im fcc System)

Es ist die jeweils für das energetisch tiefste Band die explizite Energierelation im fcc-Gitter mit kubischer Gitterkonstante a entlang der $\Gamma - X-$, $X - W - W - L-$ und $L-\Gamma$-Richtung zu bestimmen. Es sei Γder Punkt $(0, 0, 0)$. Für die k-Vektoren die im reziproken Raum auf die Punkte X, W und L zeigen folgt, wobei wir ausnutzen können das der reziproke Raum des fcc-Gitters das bcc-Gitter ist:

$$
\begin{aligned}
\vec{k}_X &= \frac{\pi}{a}\,(2\,k_x + 0\,k_y + 0\,k_z) \\
\vec{k}_L &= \frac{\pi}{a}\,(1\,k_x + 1\,k_y + 1\,k_z) \\
\vec{k}_W &= \frac{\pi}{a}\,(2\,k_x + 1\,k_y + 0\,k_z)
\end{aligned}
$$

(s. Kittel S. 44,45 und Folien 17 bzw. 6). Für L und X kann man dies direkt aus dem Kittel übernehmen [wobei der Kittel vermutlich um einen Faktor 2 fehlerhaft ist, da die Kantenlänge mit $\frac{4\pi}{a}$ angegeben wird und Vektoren mit $\frac{2\pi}{a}\,(\pm 2x)$, wobei mit diesen die Kantenlänge $2 \cdot \frac{4\pi}{a}$ betragen würde und hierdurch ein Faktor 2 hereinkommt bei Kittel] (bzw. sich auch selbst durch eine Zeichnung klar machen, wobei dies für X trivial ist und für L auch durch geometrische Überlegungen schnell erreicht ist), für W ist dies schon schwerer, jedoch sieht man sofort, dass die x-Komponente gleich der x-Komponente von X ist, also 2 und die z-Komponenten 0 ist, somit muss nur noch die y-Komponente bestimmt werden. Durch hingucken erkennt man die y-Komponente als 1, da das Quadrat 2 mal in den Würfel passt und der Abstand von X zu W gerade ein halbes dieser Quadrate entspricht ($\frac{1}{4}$ Kantenlänge also), wobei X sich genau im Mittelpunkt befindet. Weiter beachten wir dann noch, dass der Abstand von L zu X mit $2k_x$ gegeben ist, somit also die Kästchenbreite $4\,k_x$ entspricht (aus der positiven und negativen k_x-Richtung), damit ist aber $\frac{1}{4} \cdot 4\,k_y = k_y$, da $|k_y| = |k_x| = |k_z|$.

Für die parametrisierten Kurven für die jeweiligen Richtungen ergibt sich somit:

$$
\begin{aligned}
\Gamma - X: \quad \vec{G} = &\quad (1-t)\,\vec{k}_\Gamma + t\vec{k}_X = t\vec{k}_X = t\,\frac{2\pi}{a}\,k_x \\
X - W: \quad \vec{G} = &\quad (1-t)\,\vec{k}_X + t\vec{k}_W = \frac{\pi}{a}\,(2\,k_x + t\,k_y) \\
W - L: \quad \vec{G} = &\quad (1-t)\,\vec{k}_W + t\vec{k}_L = \frac{\pi}{a}\,[(k_x + k_y + k_z) + t\,(k_x - k_z)] \\
L - \Gamma: \quad \vec{G} = &\quad (1-t)\,\vec{k}_L + t\vec{k}_\Gamma = (1-t)\,\vec{k}_L = (1-t)\,\frac{\pi}{a}\,(k_x + k_y)
\end{aligned}
$$

Für die Energien folgt somit:

$$
\begin{aligned}
\Gamma - X: \quad & E\left(t\vec{k}_X\right) = && \frac{\hbar^2}{2m}\left[t\,\frac{2\pi}{a}\,k_x\right]^2 \\
X - W: \quad & E\left((1-t)\,\vec{k}_X + t\vec{k}_W\right) = && \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (2\,k_x + t\,k_y)^2 \\
W - L: \quad & E\left((1-t)\,\vec{k}_W + t\vec{k}_L\right) = && \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 [(k_x + k_y + k_z) + t\,(k_x - k_z)]^2 \\
L - \Gamma: \quad & E\left((1-t)\,\vec{k}_L\right) = && \frac{\hbar^2}{2m}\,(1-t)^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (k_x + k_y)^2
\end{aligned}
$$

9.3 (Näherungslösung für die Energielücke an der Zonengrenze)

Es ist zu zeigen, dass die Energielücke, die am Rand der Brillouin-Zone auf Grund des periodischen Potentials entsteht, eine Breite von $E_g = 2U_G$ besitzt. Das Potential ist gegeben durch $U(x) = \sum_G U_G e^{iGx}$ mit $U_G \ll E_{\vec{k}}$. Es sind nur die beiden dominanten Glieder $C\left(\pm\frac{1}{2}G\right)$ der Fourier-Entwicklung der Wellenfunktion $\psi_k(x) = \sum_G C(k-G)\, e^{i(k-G)x}$ zu betrachten, wobei die restlichen vernachlässigt werden können. Es gilt die Schrödingergleichung:

$$H\psi_k = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_k + U(x)\,\psi_k = E\psi_k,$$

einsetzen liefert:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G (k-G)^2\, C(k-G)\, e^{i(k-G)x} + \sum_G U_G C(k-G)\, e^{ikx} = E\sum_G C(k-G)\, e^{i(k-G)x}$$

Wir setzen $k = k - G$ für die zweite Summe und erhalten:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G (k-G)^2\, C(k-G)\, e^{i(k-G)x} + \sum_G U_G C(k-2G)\, e^{i(k-G)x} = E\sum_G C(k-G)\, e^{i(k-G)x}$$

Es müssen die Koeffizienten für jede Fourier-Komponente auf beiden Seiten gleich sein, daher folgt:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}(k-G)^2 - E\right) C(k-G) + \sum_G U_G C(k-2G) = 0$$

mit $\lambda_{k-G} = \frac{\hbar^2}{2m}(k-G)^2$ folgt also:

$$(\lambda_{k-G} - E)\, C(k-G) + \sum_G U_G C(k-2G) = 0.$$

Wir können aber auch $k = k + G$ setzen, somit folgt also unser altes Ergebnis:

$$(\lambda_k - E)\, C(k) + \sum_G U_G C(k-G) = 0.$$

Diese liefert das lineare Gleichungssystem der Schrödingergleichung im Impulsraum, dass zu lösen ist. Betrachten dieser Gleichung in der Nähe der Zonengrenze, wobei $k = \pm\frac{1}{2}G$ ist, liefert die zwei Gleichungen:

$$\begin{aligned}
(\lambda_k - E)\, C\left(\frac{1}{2}G\right) + U_G C\left(\frac{1}{2}G - G\right) &= 0 \\
(\lambda_k - E)\, C\left(-\frac{1}{2}G\right) + U_G C\left(-\frac{1}{2}G + G\right) &= 0
\end{aligned}$$

Dies folgt weil wir alle Koeffizienten bis auf $C\left(\pm\frac{1}{2}G\right)$ vernachlässigen dürfen, da diese die dominierenden Koeffizienten sind. Zudem gilt $\lambda_k = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\pm\frac{1}{2}G\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{2}G\right)^2$. Somit folgt also:

$$\begin{aligned}(\lambda_k - E)\,C\left(\frac{1}{2}G\right) + U_G C\left(-\frac{1}{2}G\right) &= 0\\(\lambda_k - E)\,C\left(-\frac{1}{2}G\right) + U_G C\left(\frac{1}{2}G\right) &= 0\end{aligned}$$

Schreiben wir dieses nun in Matrixform und setzen die Determinante gleich Null, so folgt:

$$\begin{vmatrix}\lambda_k - E & U_G\\ U_G & \lambda_k - E\end{vmatrix} = 0 = (\lambda_k - E)^2 - U_G^2,$$

oder nach umformen:

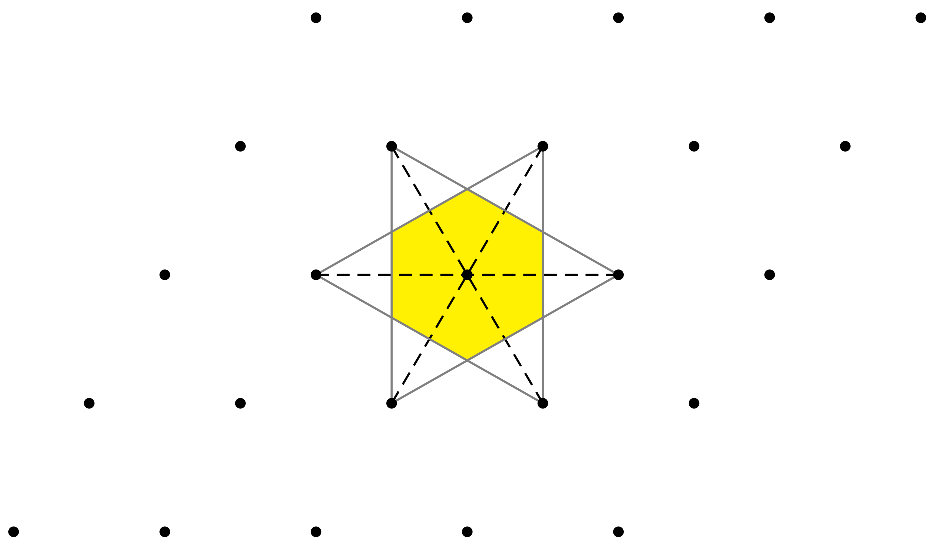
$$E = \lambda_k \mp U_G.$$

Wir erhalten also die zwei Energiewerte $E_1 = \lambda_k - U_G$ und $E_2 = \lambda_k + U_G$, wobei die Energielücke zwischen diesen:

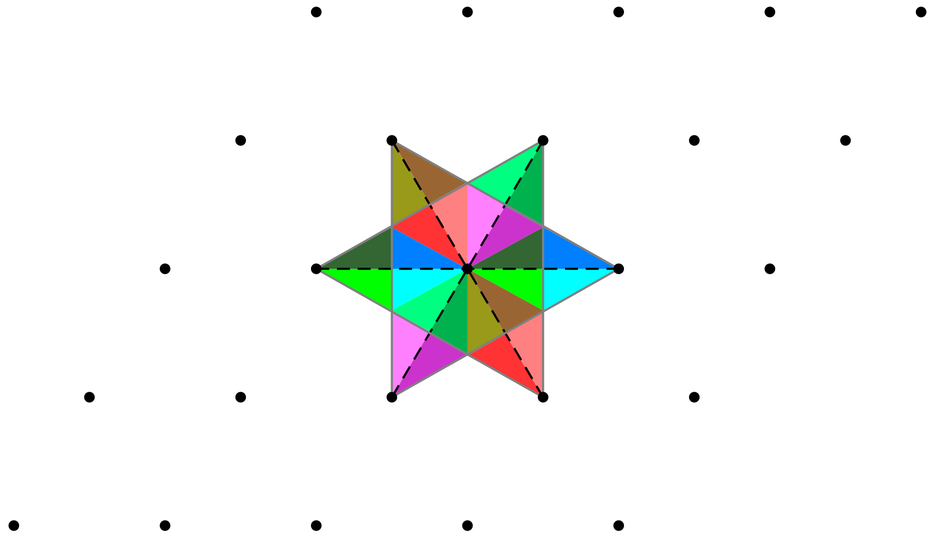
$$E_g = E_2 - E_1 = 2\,U_G$$

beträgt.

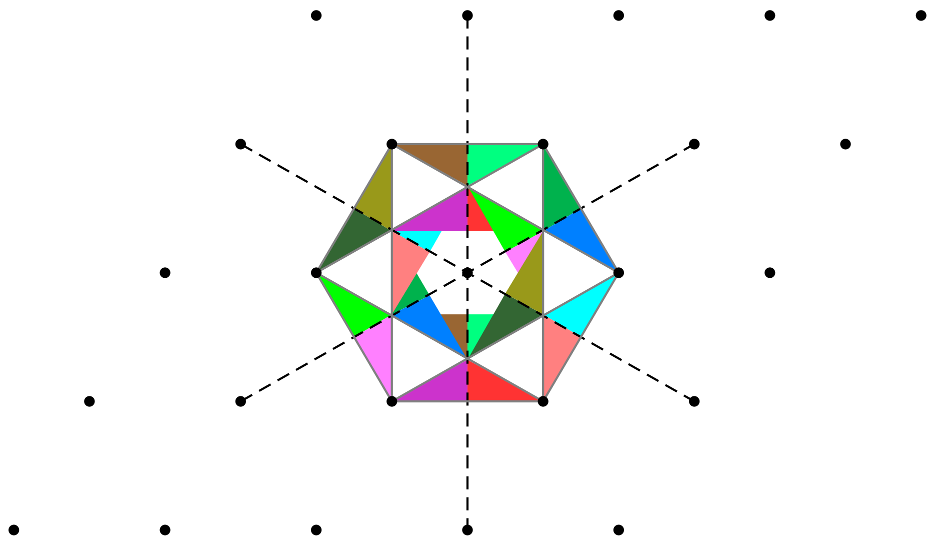
9.4 (Brillouin-Zonen in 2-D vom hexagonalen Gitter)



1. *Brillouin Zone*

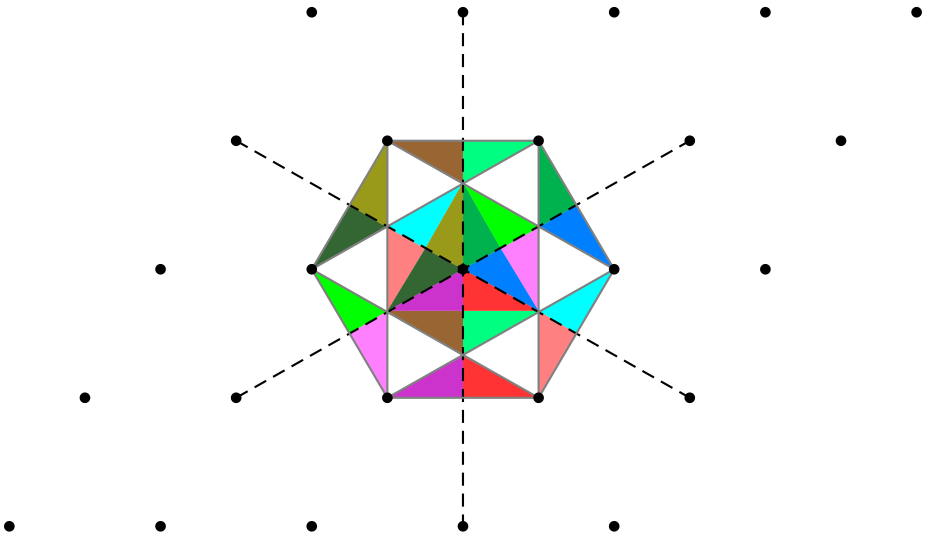


2. *Brillouin Zone*

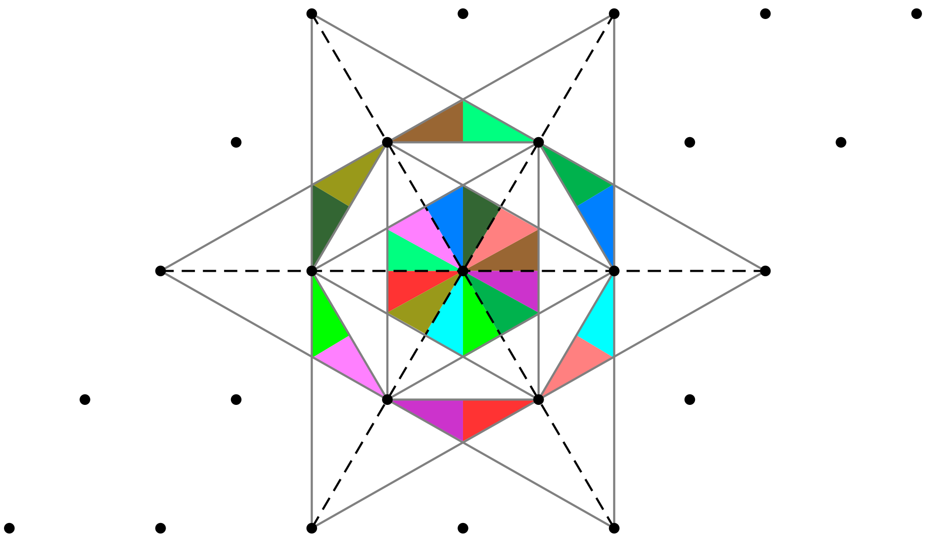


3. *Brillouin Zone*

Die 3. Brillouin Zone liefert ein Loch, wenn man um $\vec{G}$ verschiebt. Alternativ kann man jedoch sehen das man ohne Drehung der Teilflächen diese auch zur 1. Brillouin-Zone zusammenschieben kann. (Leider fand vor den Weihnachtsferien kein Tutorium mehr statt, daher bestand auch nicht die Möglichkeit zu erfragen, wie diese Verschiebungen genau definiert sind. Ich biete daher beide Möglichkeiten an, da auch aus dem Kittel bzw. Folien nicht eindeutig erkennbar ist, wie das Schema auszuführen ist.)



alternativ : 3. *Brillouin Zone*



4. *Brillouin Zone*