

8. Übungsblatt zur "Einführung in die Festkörperphysik" WS 05/06

M. Wolf/K. Starke/I. Torrente

Ausgabe: 12. 12. 05

Abgabe: Dienstag, 10. 1. 06, bis 17 Uhr

Postfach Torrente, bei Raum 0.3.18

Postfach Starke, bei Raum 1.2.46

1. Energie von freien Elektronen im reduzierten Zonenschema (8 P)

Betrachten Sie in einem quadratischen (2-dimensionalen) Gitter mit Gitterkonstante a die Energiebänder von freien Elektronen in der Näherung des "leeren Gitters" (d.h. konstantes Kristallpotential). Transformieren Sie die Wellenvektoren $\mathbf{K}$ im erweiterten Zonenschema so, dass $\mathbf{k} = \mathbf{K} - \mathbf{G}$ in der ersten Brillouinzone liegt. Zeichnen Sie die Energien aller Bänder im reduzierten Zonenschema entlang der [10] und [11] Richtung bis zum achtfachen der niedrigsten Bandenergie E_0 bei $k = \pi/a$ in [10] Richtung. Verwenden Sie dazu die Energie E_0 als Einheit. Kennzeichnen Sie die Bänder durch die zugehörigen $\mathbf{G}$.

2. Schrödingergleichung und Energiebandlücken im periodischen Potential (15 P)

(a) Für ein periodisches Potential $V(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}}$ kann die Schrödinger-Gleichung im reziproken Raum, $\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0$, mit folgendem Ansatz gelöst werden

(vgl. Vorlesung):
$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} C(\mathbf{k} - \mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{G})\cdot\mathbf{x}}$$

Zeigen Sie, dass diese Lösung eine Blochfunktion ist (3P).

(b) Am Rand der ersten Brillouinzone ($k=\pm\pi/a$) einer Kette von Atomen mit Atomabstand a überlagern sich propagierende Elektronenwellen entgegengesetzter Ausbreitungsrichtung zu stehenden Wellen. Nutzen Sie den Ansatz in (a), um zu zeigen, dass die Wellenfunktionen am Zonenrand gegeben sind durch:

$$\psi_+ = \sqrt{2/a} \cos(\pi x/a) \quad \text{und} \quad \psi_- = \sqrt{2/a} i \sin(\pi x/a) \quad (3P)$$

(c) Berechnen Sie die Energie der Bandlücke am Zonenrand ($k=\pm\pi/a$) für diese Wellenfunktionen unter Annahme des periodischen Potentials der Form $V(\mathbf{x})=2V_G \cdot \cos(2\pi x/a)$. Hinweis: Bilden Sie die Differenz des Energie-Erwartungswertes für ψ_+ und ψ_- im Potential $V(\mathbf{x})$. (3P)

(d) Skizzieren Sie den Bandverlauf $E(k)$ für $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ im erweiterten Zonenschema für eine Kette von Cu-Atomen ($a=2.55 \text{ \AA}$) mit den Fourierkoeffizienten $V_{2\pi/a} = V_{4\pi/a} = 0.5 \text{ eV}$ und $V_{6\pi/a} = 0.25 \text{ eV}$. Wie viele Bänder und Bandlücken gibt es bis $E(3\pi/a)$ und welche reziproken Gittervektoren werden jeweils benötigt, um eine Reduktion auf die erste Brillouinzone durchzuführen? (6P)