WALTHER–MEIßNER–INSTITUT 2. Februar 2017
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Lehrstuhl für Technische Physik E23, Technische Universität München
Prof. Dr. Rudolf Gross, Dr. Stephan Geprägs
Tel.: +49 (0)89 289 14225
E-mail: stephan.gepraegs@wmi.badw.de **Blatt 13**

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I
WS 2016/2017

8 Energiebänder

8.4 Zweidimensionales System stark gebundener Elektronen

Wir betrachten ein einfach quadratisches Gitter mit Gitterkonstante a und einer Tight-binding-Bandstruktur der Elektronen,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) - 2] \; . \tag{1}$$

(a) Skizzieren Sie das reziproke Gitter und die erste Brillouin-Zone.

(b) Wo liegen das Minimum und das Maximum des Bandes? Wie groß ist die Bandbreite in Einheiten von t?

(c) Zeichnen Sie qualitativ den Verlauf des Bandes längs der Linie (0,0)-(π/a, 0)-(π/a, π/a)-(0,0). Geben Sie bei der Beschriftung der y-Achse die Energie in Einheiten von t an.

(d) Geben Sie den funktionalen Zusammenhang für die Gruppengeschwindigkeit der Elektronen $\mathbf{v}(\mathbf{k})$, und die Beträge $|\mathbf{v}(\mathbf{k})|$ für die [10] und die [11]-Richtung an. Wo ist die Geschwindigkeit maximal?

(e) Zeichnen Sie in der Brillouin-Zone die Verbindungslinie von (π/a, 0) nach (0, π/a) und geben Sie einen funktionalen Zusammenhang für diese Linie im reziproken Raum an.

(f) Berechnen Sie die Energie längs der Linie aus Aufgabe (e).

(g) Das Band liege oberhalb des letzten vollständig gefüllten Bandes und habe keinen Überlapp mit anderen Bändern. Wie groß ist die Bandfüllung für $\varepsilon_F = 2t$? Begründen Sie Ihre Antwort.

(h) Berechnen Sie für eine Füllung von 0.1 Elektronen pro Elementarzelle den Fermi-Impuls, die Fermi-Energie, sowie deren Zahlenwerte für $t = 1\,\mathrm{eV}$ und $a = 4\,\text{Å}$. Hinweis: Verwenden Sie die quadratische Näherung für die Kosinus-Funktionen am Bandminimum.

8.5 Dreidimensionales System stark gebundener Elektronen

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

$$\epsilon(\mathbf{k}) \quad = \quad \epsilon_0 - t \sum_j \mathrm{e}^{\imath \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \quad ,$$

wobei die Summe über solche Vektoren des Bravais-Gitters läuft, die den Ursprung mit seinen nächsten Nachbarn verbinden. Die Größe t ist das für alle nächsten Nachbarn als gleich angenommene Überlappungsintegral.

(a) Berechnen Sie $\epsilon(\mathbf{k})$ für ein fcc-Gitter.

(b) In der Nähe des Γ-Punktes kann man eine Taylor-Entwicklung von $\epsilon(\mathbf{k})$ nach $\mathbf{k}$ durchführen und erhält so einen Zusammenhang mit dem Spektrum *freier* Elektronen der effektiven Masse $m^\star$. Wie hängt die effektive Masse $m^\star$ vom Überlappungsintegral t und der Gitterkonstanten a ab?

(c) Wie groß muss t für $a = 3\,\text{Å}$ sein, damit die effektive Masse gleich der Masse der freien Elektronen ist?

(d) Für ein orthorhombisches Gitter ergebe eine Tight-bindung Rechnung die Bandstruktur $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - 2\left[t_a \cos k_x a + t_b \cos k_y b + t_c \cos k_z c\right]$, wobei die Längen a, b und c die Abmessungen der Einheitszelle darstellen. Berechnen Sie die Komponenten des Vektors der Gruppengeschwindigkeit

$$\mathbf{v}_\mathbf{k} \quad = \quad \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

und zeigen Sie, dass der Tensor der effektiven Masse

$$\left\{\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{k})\right\}_{\mu\nu} \quad = \quad \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu}$$

für alle Vektoren k diagonal ist. Diskutieren Sie ferner den Spezialfall, dass k in einer Umgebung des Zentrums Γ der Brillouin-Zone liegt.