

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I
WS 2017/2018**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,

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

- (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 $(0,0)$ - $(\pi/a,0)$ - $(\pi/a,\pi/a)$ - $(0,0)$. 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 $(\pi/a,0)$ nach $(0,\pi/a)$ 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 $t = 1 \text{ eV}$ und $a = 4 \text{ \AA}$. 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

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

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.

- Berechnen Sie $\epsilon(\mathbf{k})$ für ein fcc-Gitter.
- 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^* . Wie hängt die effektive Masse m^* vom Überlappungsintegral t und der Gitterkonstanten a ab?
- Wie groß muss t für $a = 3 \text{ \AA}$ sein, damit die effektive Masse gleich der Masse der freien Elektronen ist?
- Für ein orthorhombisches Gitter ergebe eine Tight-binding Rechnung die Bandstruktur $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - 2 [t_a \cos k_x a + t_b \cos k_y b + t_c \cos k_z c]$, wobei die Längen a , b und c die Abmessungen der Einheitszelle darstellen. Berechnen Sie die Komponenten des Vektors der Gruppengeschwindigkeit

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

und zeigen Sie, dass der Tensor der effektiven Masse

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

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