INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. Ch. Jurecka

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK SS 1999

2. Übungsblatt

5. **Bandstruktur des einfach kubischen Gitters**

Die Einheitszelle des kubischen Gitters wird definiert durch die Basisvektoren

$$a = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad b = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad c = a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

(a) Berechnen Sie Basisvektoren des reziproken Gitters.

Zunächst soll nun die Bandstruktur für freie Elektronen zwischen

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad X = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

berechnet werden. Hierzu müssen die $\mathbf{k}$ Vektoren der Elektronen mittels geeigneter Translationen um reziproke Gittervektoren K_n in die erste Brioullinsche Zone "geklappt" werden.

(b) Geben Sie einen allgemeinen Ausdruck für die Energiebänder zwischen Γ und X an, der nur noch von Entwicklungskoeffizienten der reziproken Gittervektoren in der oben berechneten Basis und einem kontinuierlichem Parameter κ abhängt.

(c) Berechnen Sie mit Hilfe des Ergebnisses aus (b) die sechs niedrigsten Bänder und skizzieren Sie deren Verlauf. Geben Sie dazu jeweils an, wievielfach das Band entartet ist und welche Translationen auf das Band führten.

Nun soll der Einfluß eines (schwachen) gitterperiodischen Potentials

$$V(x) = \sum_n v_n e^{iK_n x} \tag{3}$$

auf die Bänder betrachtet werden.

(d) Zeigen Sie zunächst, daß

$$< k'|V|k >= \sum_n v_n \delta_{k',k+K_n}, \tag{4}$$

wobei $|k>$ Zustände der freien Elektronen sind.

(e) Berechnen Sie mittels (entarteter) Störungstheorie erster Ordnung den Einfluß des gitterperiodischen Potentials auf das niedrigste vierfach entartete Band. Überlegen Sie sich, wie die Fourierkoeffizienten in (3) von verschiedenen, aber über Gittertransformationen ineinander überführbaren reziproken Vektoren aussehen.

6. **Zugabe** Eindimensionale periodische Potentiale