INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

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

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK SS 1999

3. Übungsblatt

---

7. **kp-Störungstheorie dreier Bänder**[1]

Betrachten Sie einen Modellfestkörper mit 3 Bändern. Bei $\mathbf{k} = 0$ sind die Energieniveaus bekannt:

Der tiefste Zustand ist $|xy\rangle$, um ΔE darüber liegen die entarteten $|x\rangle$ und $|y\rangle$. Diese Zustände[2] verhalten Sich bei Symmetrietransformationen, wie die Funktionen xy, x bzw. y. Nehmen Sie nun an, daß der Kristall ein Inversionszentrum besitzt.

In dieser Aufgabe soll der Verlauf der Energieniveaus um $\mathbf{k} = 0$ mittels Störungstheorie in $H_{st} = \frac{1}{m}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ berechnet werden.

(a) Begründen Sie, warum aus der Symmetrie des Kristalls unter Raumspiegelung folgt, daß Korrekturen erster Ordnung in H_{st} verschwinden.

Zweite Ordnung Störungstheorie läuft auf die Berechnung von Matrixelementen

$$\langle i|H_{st}|j\rangle_{2.O} = \sum_m \frac{\langle i|H_{st}|m\rangle\langle m|H_{st}|j\rangle}{E_j - E_m} \tag{1}$$

hinaus. Bei Entartung müssen auch Nichtdiagonalelemente betrachtet werden.

(b) Zeigen Sie:

$$\begin{aligned}
\langle xy|H_{st}|xy\rangle_{2.O} &= -\frac{A^2}{m^2\Delta E}(k_x^2 + k_y^2) \\
\langle xy|H_{st}|x\rangle_{2.O} &= 0 \\
\langle xy|H_{st}|y\rangle_{2.O} &= 0 \\
\langle x|H_{st}|x\rangle_{2.O} &= \frac{A^2}{m^2\Delta E}k_x^2 \\
\langle y|H_{st}|y\rangle_{2.O} &= \frac{A^2}{m^2\Delta E}k_y^2 \\
\langle x|H_{st}|y\rangle_{2.O} &= \frac{A^2}{m^2\Delta E}k_x k_y
\end{aligned} \tag{2}$$

wobei

$$A = |\langle x|p_y|xy\rangle| = |\langle y|p_x|xy\rangle|$$

(c) Berechnen Sie die Energiekorrekturen zweiter Ordnung. Beachten Sie hierbei, daß das $|xy\rangle$ Band von den Anregungszuständen durch eine Energielücke ΔE getrennt ist. Geben Sie die Energien der Bänder an.

(d) Berechnen Sie die effektiven Massentensoren der drei Bänder.

8. **Zugabe** Zustandsdichte

---

[1] In dieser Aufgabe wird $\hbar = 1$ gesetzt.

[2] Das Fehlen der z-abhängigen Zustände kann dadurch zustandekommen, daß diese durch das Kristallpotential energetisch so ungünstig sind, daß ihr Beitrag in der Störungstheorie vernachlässigbar ist.