INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. C. Jurecka
Dipl.-Phys. F. Heidrich-Meisner

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK WS 2001/2002

4. Übungsblatt

6. **Bandstruktur des Dreiecksgitters**

Die Einheitszelle des Dreiecksgitters wird definiert durch die Basisvektoren

$$\mathbf{a_1} = \mathbf{x} \qquad \mathbf{a_2} = \frac{\mathbf{x}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y} \tag{1}$$

wobei $\mathbf{x}$ und $\mathbf{y}$ Einheitsvektoren in Richtung der Koordinatenachsen sind.

(a) Berechnen Sie Basisvektoren des reziproken Gitters.

(b) Skizzieren Sie das reziproke Gitter. Zeichnen Sie die ersten drei Brioullinschen Zonen ein.

(c) Bestimmen Sie anhand Ihrer Skizze die Fermifläche für die Elektronendichten $N/V = 1, 2, 3$. Hinweis: Zeichnen Sie in Ihre Skizze einen Kreis mit Radius entsprechend der jeweiligen Dichte ein.

(d) Zeichnen Sie die Punkte $K = (0, 2\pi/\sqrt{3})$ und $M = (2\pi/3, 2\pi/\sqrt{3})$ in Ihre Skizze ein.

Nun soll die Bandstruktur für freie Elektronen zwischen $\Gamma = (0, 0, 0)$ und den Punkten K bzw. M berechnet werden. Hierzu müssen die $\mathbf{k}$ Vektoren der Elektronen mittels geeigneter Translationen um reziproke Gittervektoren $\mathbf{K_n}$ in die erste Brioullinsche Zone "geklappt" werden.

(e) 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.

(f) Berechnen Sie mit Hilfe des Ergebnisses aus (b) jeweils die drei 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

$$V(x) = \sum_n v_n e^{iK_n x} \tag{2}$$

auf die Bänder betrachtet werden.

(g) Zeigen Sie zunächst, daß

$$< k'|V|k >= \sum_n v_n \delta_{k',k+K_n}, \tag{3}$$

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

(h) Berechnen Sie mittels (entarteter) Störungstheorie erster Ordnung den Einfluß des gitterperiodischen Potentials auf das oben erhaltene zweifach entartete Band.