INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

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

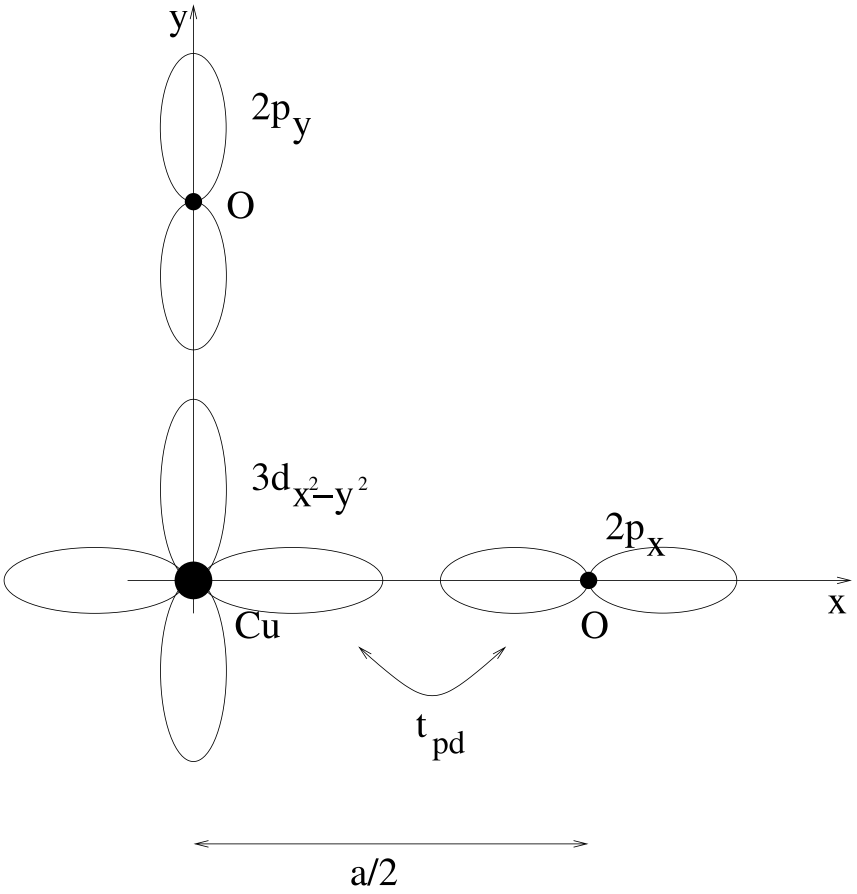
THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK WS 2001/2002

6. Übungsblatt

---

8. **3-Band Modell für Hochtemperatursupraleiter**

Die elektronischen Eigenschaften von Hochtemperatursupraleitern werden im wesentlich von Kupfer-Sauerstoff-Ebenen bestimmt. In der Abbildung sind die Elementarzelle der $\mathrm{CuO_2}$ Ebene mit Gitterkonstante a sowie die für die Bandstruktur entscheidenden Cu $3d_{x^2-y^2}$ und O p_x, p_y Orbitale dargestellt. Nun soll die tight-binding Bandstruktur bestimmt werden. $\psi_d(\mathbf{r})$ sei die atomare Wellenfunktion des Cu Orbitals, $\psi_{x(y)}(\mathbf{r})$ die des Sauerstoff $x(y)$ Orbitals.



- Gegeben ist das "Hüpfmatrixelement" $\langle\psi_d(r)|H|\psi_x(\mathbf{r}-a/2\mathbf{e_x})\rangle = t_{pd}$. Begründen Sie, daß $\langle\psi_d(r)|H|\psi_x(\mathbf{r}+a/2\mathbf{e_x})\rangle = -t_{pd}$ gilt. $\mathbf{e_x}$ ist der Einheitsvektron in x-Richtung. Bestimmen Sie aus ähnlichen Symmetrieüberlegungen die Matrixelemente in y-Richtung. Weiterreichende Hüpfprozesse sollen in der Folge vernachlässigt werden.
- Machen Sie einen LCAO Ansatz für die drei Wellenfunktionen und bestimmen Sie die Hamiltonmatrix.
- Berechnen Sie daraus die Bandstruktur. Nehmen Sie dafür an, daß weder Orbitale aus benachbarten Elementarzellen noch innerhalb der Zelle überlappen.