UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Guido Burkard
Matthias Droth

Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2010 - Übungsblatt 11

Ausgabe: 21.01.2011, Abgabe: 28.01.2011

Aufgabe 34: Wellenfunktionen am L-Punkt des Zinkblende Gitters (6 Punkte)

Nutzen sie die symmetriesierten Wellenfunktionen für $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{a}(1,1,1)$ im Modell beinahe freier Elektronen im Zinkblende Kristall,

$$\Gamma_1: \qquad \sqrt{\frac{8}{a^3}}\cos\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{2\pi y}{a}\cos\frac{2\pi z}{a},$$

$$\Gamma_4(x): \qquad \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{2\pi y}{a}\cos\frac{2\pi z}{a},$$

und entsprechende Wellenfunktionen für $\Gamma_4(y)$ und $\Gamma_4(z)$,

um zu zeigen, dass die Matrixelemente des Impulsoperators $\boldsymbol{p}$ zwischen den Γ_1 und Γ_4 Wellenfunktionen durch

$$|\langle\Gamma_1|p_x|\Gamma_4(x)\rangle|^2 = |\langle\Gamma_1|p_y|\Gamma_4(y)\rangle|^2 = |\langle\Gamma_1|p_z|\Gamma_4(z)\rangle|^2 = \left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^2$$

gegeben sind, während alle anderen Matrixelemente von p_i, z.B. $|\langle\Gamma_1|p_x|\Gamma_4(y)\rangle|^2$, verschwinden.

Aufgabe 35: $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ Rechnungen (6 Punkte)

Benutzen Sie ein Rechenprogramm, welches Matrizen diagonalisiseren kann, um die Valenzbandstruktur von GaAs zu berechnen. Die benötigten Parameter sind $P^2/m = 13\,\mathrm{eV}$, $Q^2/m = 6\,\mathrm{eV}$, $E_0 = 1,519\,\mathrm{eV}$, $E_0' = 4,488\,\mathrm{eV}$, $\Delta_0 = 0,34\,\mathrm{eV}$ und $\Delta_0' = 0,171\,\mathrm{eV}$.

Hinweis: Es wird die Dispersionsrelation von Elektronen in einem Kristall gesucht. Die Energien eines Blochelektrons mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ ist ein Eigenzustand des entsprechenden Hamiltonoperators. Daher ist die Bandstruktur durch die Eigenenergien des Blochelektrons als Funktion von $\boldsymbol{k}$ gegeben. Im Internet steht Ihnen unter
`http://theorie.physik.uni-konstanz.de/burkard/sites/default/files/10tfkp/Aufgabe35.nb`
eine Mathematicadatei zur Verfügung.

⇒

Benutzen Sie den 6×6 Hamiltonoperator

$$
\begin{aligned}
H_{11}^{'} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(L+M\right)\left(k_x^2+k_y^2\right) + M k_z^2,\\
H_{12}^{'} &= -\frac{L+M}{\sqrt{3}}\left(k_x k_z - i k_y k_z\right),\\
H_{13}^{'} &= -\frac{1}{2\sqrt{3}}\left((L-M)(k_x^2-k_y^2) - 2i\left(L+M\right)k_x k_y\right),\\
H_{14}^{'} &= 0,\\
H_{15}^{'} &= \frac{1}{\sqrt{2}} H_{12}^{'},\\
H_{16}^{'} &= -\sqrt{2} H_{13}^{'},\\
H_{22}^{'} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{3}\left(M+2L\right)k^2 - \frac{1}{2}\left(L-M\right)\left(k_x^2+k_y^2\right),\\
H_{23}^{'} &= 0,\\
H_{24}^{'} &= H_{13}^{'},\\
H_{25}^{'} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(H_{22}^{'} - H_{11}^{'}\right),\\
H_{26}^{'} &= \sqrt{\frac{3}{2}} H_{12}^{'},\\
H_{33}^{'} &= H_{22}^{'},\\
H_{34}^{'} &= -H_{12}^{'},\\
H_{35}^{'} &= -\left(H_{26}^{'}\right)^*,\\
H_{36}^{'} &= H_{25}^{'},\\
H_{44}^{'} &= H_{11}^{'},\\
H_{45}^{'} &= -\sqrt{2}\left(H_{13}^{'}\right)^*,\\
H_{46}^{'} &= -\left(H_{15}^{'}\right)^*,\\
H_{55}^{'} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{1}{3}\left(2M^{'} + L^{'}\right)k^2 - \Delta_0,\\
H_{56}^{'} &= 0,\\
H_{66}^{'} &= H_{55}^{'},
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
L &= \frac{-\hbar^2 P^2}{m^2 E_0},\\
M &= \frac{-\hbar^2 Q^2}{m^2 E_0^{'}},\\
L^{'} &= \frac{-\hbar^2 P^2}{m^2\left(E_0+\Delta_0\right)},\\
M^{'} &= \frac{-\hbar^2 Q^2}{m^2\left(E_0^{'}+\Delta_0^{'}\right)}.
\end{aligned}
$$