

Theoretische Festkörperphysik
Wintersemester 2010 - Übungsblatt 9
 Ausgabe: 17.12.2010, Abgabe: 11.01.2011

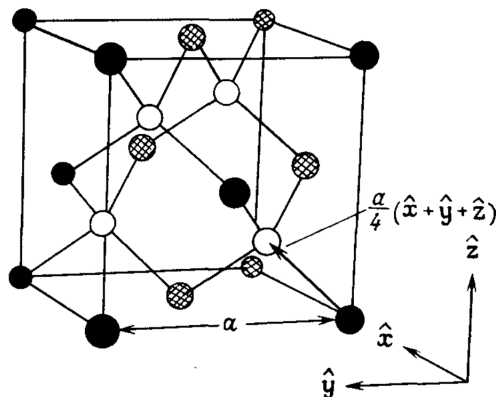
Aufgabe 28: Bravais-Gitter

(4 Punkte)

a) **Symmetrie**

Zeigen Sie, dass ein Bravais-Gitter in jedem Gitterpunkt inversionssymmetrisch ist.

Hinweis: Drücken Sie das Bravais-Gitter als Linearkombinationen primitiver Gittervektoren mit ganzzahligen Koeffizienten aus.



b) **Diamantstruktur**

Zeigen Sie, dass die Diamantstruktur inversionssymmetrisch bezüglich dem Mittelpunkt zweier beliebiger benachbarter Atome ist. Warum gilt dies nicht für die Zinkblendestruktur?

Hinweis: Die Diamantstruktur entspricht zwei ineinander gestellten kubisch-flächenzentrierten (fcc) Untergitter, die um $\mathbf{b}_1 = \mathbf{0}$ bzw. $\mathbf{b}_2 = (a/4)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ verschoben sind. Die Gittervektoren können also, je nachdem zu welchem Untergitter sie gehören, als $\mathbf{R}_1 = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i + \mathbf{b}_1$ bzw. $\mathbf{R}_2 = \sum_{i=1}^3 m_i \mathbf{a}_i + \mathbf{b}_2$ geschrieben werden. Die Inversion bezüglich dem Mittelpunkt zweier beliebiger benachbarter Atome ist

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = 2\mathbf{X} - \mathbf{r},$$

wobei $\mathbf{X} = \frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$.

Aufgabe 29: Spin-Bahn-Kopplung

(4 Punkte)

Der Hamiltonoperator für die Spin-Bahn-Kopplung im zweidimensionalen Elektronengas (2-DEG) ist

$$\mathcal{H}_{SO} = \alpha(\mathbf{k} \times \nabla V) \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

wobei V ein Potential ist, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$ und $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sind die Pauli-Matrizen.

a) Spin-Bahn-Aufspaltung

Lösen Sie das Eigenwertproblem für die freien 2-DEG-Elektronen unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung. Die Einschränkung in die $x - y$ -Ebene erfolgt durch ein Potential V mit $\nabla V \parallel (0, 0, 1)$.

Hinweis: Benutzen Sie den Hamiltonoperator $\mathcal{H} = E_k + \mathcal{H}_{SO}$ sowie $k_{\pm} = k_x \pm ik_y = k e^{\pm i\phi}$ und $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$.

b) Ausrichtung des Spins bezüglich \mathbf{k}

Berechnen Sie die Erwartungswerte des Spin-Operators $\boldsymbol{\sigma}$ in Abhängigkeit der Richtung von \mathbf{k} und stellen Sie das Ergebnis graphisch dar. Identifizieren Sie die Kramers-Paare.

Hinweis: Benutzen Sie die Eigenwerte in der $x - y$ -Ebene

$$|\mathbf{k}, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i e^{i\phi} \end{pmatrix}.$$

Aufgabe 30: LCAO und Tight-Binding-Näherung

(4 Punkte)

Das einfachste Beispiel für die Linearkombination von Atomorbitalen (LCAO) ist das Energieband in einem Gitter aus atomaren s -Orbitalen. In diesem Fall ist das Band durch

$$E_s(\mathbf{k}) = H_{ss}(\mathbf{k}) = E_s + J_{ss}(\mathbf{k})$$

mit

$$J_{\nu\nu'}(\mathbf{k}) = \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \int d^3r \phi_{\nu'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \phi_{\nu}(\mathbf{r})$$

gegeben. Um $J_{ss}(\mathbf{k})$ auszuwerten wird über die nächsten Nachbarn summiert, was für normale und Edelmetalle unter Normalbedingungen der Kristallstruktur entspricht. Wegen der sphärischen Symmetrie des s -Orbitals hängt das Matrixelement $J_{ss}(\mathbf{R}_n)$ nicht vom Gittervektor sondern nur vom Abstand zum nächsten Nachbarn ab und man findet

$$E_s(\mathbf{k}) = E_s + J_{ss}(|\mathbf{R}_n|)f(\mathbf{k}).$$

a) Dispersion in sc- und bcc-Gittern

Berechnen Sie in der Tight-Binding-Näherung die Dispersion von Energiebändern, welche sich aus den s -Orbitalen im einfach kubischen (sc) bzw. kubisch-raumzentrierten (bcc) Gitter herleiten, für die Richtungen $\Gamma - X$ und $\Gamma - L$.

b) Breite der Bänder

Vergleichen Sie die Ergebnisse und berechnen Sie die Breite der Energiebänder.