



### 9. Übung

Aufgabe 32. (15 Punkte) **Energielücke in eindimensionalen periodischen Strukturen** Wir betrachten freie Elektronen in einem eindimensionalen, linearen Gitter (Gitterkonstante  $a$ ). Elektronen mit Wellenvektor auf dem Rand der ersten Brillouin-Zone erfahren eine Bragg- Reflexion, so dass sich stehende Wellen

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\frac{\pi x}{a}} \pm e^{-i\frac{\pi x}{a}})$$

für  $k = \pm\frac{\pi}{a}$  bilden. Aufgrund der unterschiedlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte haben die beiden Wellenfunktionen in einem periodischen Kristallpotential der Form:  $U(x) = U_0 \cos(\frac{2\pi x}{a})$  nicht dieselbe Energie, so dass an dieser Stelle des  $k$ -Raums die Energieentartung aufgehoben wird und eine Energielücke entsteht. Zeigen Sie, dass die Größe der Energieaufspaltung  $\Delta E = E_+ - E_-$  gleich der Fourier-Komponente des Kristallpotentials  $U(x)$  ist. Hinweis: Die Energie ist der Erwartungswert von  $H$ :  $E_{\pm} = \langle \Psi_{\pm} | H | \Psi_{\pm} \rangle = \int dx \Psi_{\pm}^* H \Psi_{\pm}$ .

Aufgabe 33. (15 Punkte) **Energiebänder im primitiv kubischen System** Im Rahmen der Näherung des leeren Gitters ( $U(x) \rightarrow 0$ ) ergeben sich in der ersten Brillouin-Zone für eine parabelförmige Energie-Relation  $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  des fast freien Elektronengases in einem primitiven kubischen Gitter (Gitterkonstante  $a$ ) aufgrund der Periodizität unendlich viele Energiebänder. Bestimmen Sie die explizite Energieabhängigkeit  $E(k_x)$  entlang der  $k_x$ -Achse in der ersten Brillouin-Zone für diejenigen Energie-Parabeln, die ihr Minimum bei folgenden reziproken Gittervektoren haben:  $\mathbf{G} = [111], [200], [020]$  und  $[112]$ .

Aufgabe 34. (5 Punkte) **Freie Elektronen im quadratischen und im kubischen Gitter**

- (a) Zeigen Sie für ein einfach quadratisches Gitter in 2-D, dass die kinetische Energie eines freien Elektrons am Eckpunkt der ersten Brillouin-Zone um den Faktor 2 größer ist als am Mittelpunkt der Seitenkante.
- (b) Welcher Faktor ergibt sich im Fall eines einfach kubischen Gitters (3-D) zwischen Eckpunkt und Mittelpunkt der Seitenfläche?