



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?