4. Übung zur Einführung in die Festkörpertheorie (WS 2013/14) — Prof. Krüger

Ausgabedatum: 13.12.2013 — Abgabedatum: 20.12.2013

Aufgabe 11: Spin-Bahn-Kopplung (4 Punkte)

Betrachten Sie ein quadratisches Gitter mit einem Atom pro Elementarzelle und Gitterkonstante a. Verwenden Sie die empirische Tight-Binding-Methode unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung, um die Bandstruktur zu berechnen. Verwenden Sie dazu s, p_x und p_y Orbitale für spin-auf- und spin-ab-Elektronen und berücksichtigen Sie Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn. Setzen Sie der Einfachheit halber $V_1 = -V_{s\,s} = +V_{p\,p\,\sigma} = +V_{p\,p\,\pi}$ und $V_2 = V_{s\,p}$. Verwenden Sie die Abkürzung $f\,(\vec{k}) = 2\,V_1\,(\cos\,(k_x\,a) + \cos\,(k_y\,a))$.

a) Stellen Sie die 6×6 Hamiltonmatrix auf:

$$\overline{\overline{H}}\,(\vec{k}) = \begin{pmatrix} H^{\uparrow\uparrow} & H^{\uparrow\downarrow} \\ H^{\downarrow\uparrow} & H^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} .$$

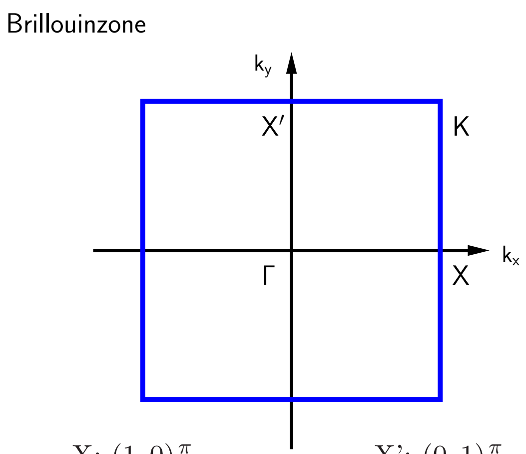
b) Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von $H^{\uparrow\uparrow}$ am Γ-Punkt.

c) Berechnen Sie die Bandstruktur $E_{n\,\vec{k}}$ für den Fall $V_2 = 0$. Zeichnen Sie die Bänder entlang $X' - \Gamma - X - M - X'$ für

i) $E_s = 2.0$ eV, $E_p = -2.2$ eV, $V_1 = 0.5$ eV, $V_2 = 0.0$ eV und $\lambda = 0.0$ eV ,

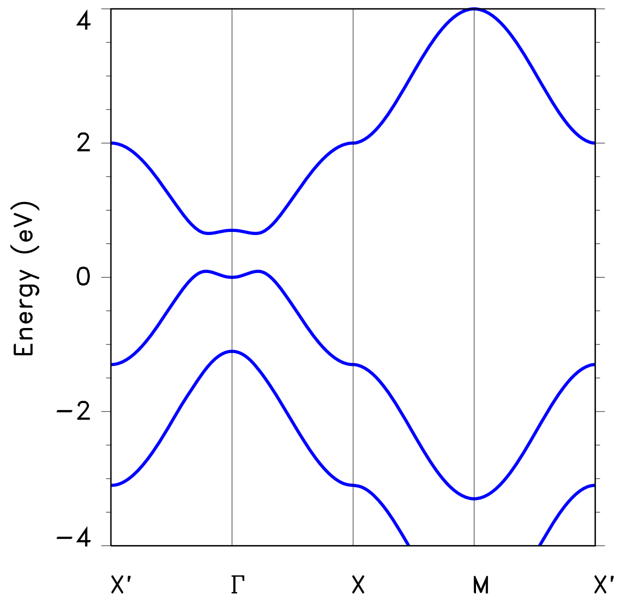
ii) $E_s = 2.0$ eV, $E_p = -2.2$ eV, $V_1 = 0.5$ eV, $V_2 = 0.0$ eV und $\lambda = 0.9$ eV .

d) Die rechte Abbildung zeigt die Bandstruktur für die Parameter von Aufgabenteil c) ii), aber mit $V_2 = 0.4$ eV. Am Γ-Punkt ergibt sich zwischen 0.0 eV und 0.7 eV eine Bandlücke. Benutzen Sie Ihre Ergebnisse aus b), um die Eigenvektoren des *energetisch höchsten* Zustands an Γ für diese Parameter zu berechnen. Was ergibt sich für die entsprechenden Eigenvektoren in c) i) und c) ii)?



X: $(1,0)\frac{\pi}{a}$ X': $(0,1)\frac{\pi}{a}$

M: $(1,1)\frac{\pi}{a}$



Aufgabe 12: Wannier-Funktionen **(3 Punkte)**

Wannier-Funktionen $W_n(\vec{r} - \vec{R}_l)$ sind lokalisierte Orbitale, die gemäß

$$W_n(\vec{r} - \vec{R}_l) = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{Zelle}}}} \sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{-i\,\vec{k}\cdot\vec{R}_l}\, \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

aus Bloch-Zuständen bestimmt werden.

a) Berechnen Sie

$$\int_\Omega W_n^*(\vec{r} - \vec{R}_l)\, W_{n'}(\vec{r} - \vec{R}_{l'})\, d^3 r \qquad \text{und} \qquad \sum_{n\,\vec{R}_l} W_n^*(\vec{r} - \vec{R}_l)\, W_n(\vec{r}\,' - \vec{R}_l)\ .$$

b) Das sogenannte Zentrum $\vec{r}_n$ einer Wannier-Funktion ist durch

$$\vec{r}_n = \int_\Omega W_n^*(\vec{r} - \vec{R}_l)\, \vec{r}\ W_n(\vec{r} - \vec{R}_l)\, d^3 r$$

gegeben. Zeigen Sie, dass es sich für $\vec{R}_l = 0$ in folgender Form aus dem gitterperiodischen Anteil $u_{n\,\vec{k}}(\vec{r})$ der Bloch-Funktion berechnen lässt:

$$\vec{r}_n = \frac{i}{N_{\text{Zelle}}} \sum_{\vec{k}} \int_\Omega u^*_{n\,\vec{k}}(\vec{r})\, \nabla_{\vec{k}}\, u_{n\,\vec{k}}(\vec{r})\, d^3 r\ .$$

Hinweise:

i) $\displaystyle\sum_{\vec{k}} \nabla_{\vec{k}}\, \psi_{n\,\vec{k}}(\vec{r}) = 0$.

ii) Für eine gitterperiodische Funktion $f(\vec{r})$ gilt: $\displaystyle\int_\Omega f(\vec{r})\, \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3 r = \delta_{\vec{k},\vec{0}} \int_\Omega f(\vec{r})\, d^3 r.$

Beachten Sie, dass alle Wellenvektoren $\vec{k}$ aus der ersten Brillouinzone stammen und alle Gittervektoren $\vec{R}_l$ in einer Born-von Karmann-Zelle liegen.

Aufgabe 13: Zustandsdichte **(3 Punkte)**

a) Im Rahmen der empirischen Tight-Binding-Näherung ist die Bandstruktur einer linearen Kette mit einem s-Orbital pro Atom durch $E_k = E_s + 2\,V_{s\,s}\cos(k\,a)$ gegeben. Berechnen Sie die Zustandsdichte

$$D(E) = 2 \sum_k \delta(E - E_k)$$

der Kette. Ersetzen Sie dabei die k-Summe durch ein Integral.

b) In einem orthorhombischen Kristall hat die Bandstruktur des Leitungsbandes in der Nähe von $\vec{k} = 0$ die Form

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*}\right)\ .$$

i) Geben Sie den Tensor der effektiven Masse $\overline{\overline{M}}$ an.

ii) Berechnen Sie die Zustandsdichte $D(E)$.