Serie 2: Raumgruppen und ihre Darstellungen

Abgabe: 2. November, 2004

Aufgabe 2.1 Aufspaltung der Entartungen in der Brillouinzone

Wir betrachten die Aufspaltung der Elektronenzustände in einem kubischen Gitter.
Nehme an, dass die Elektronenenergie in der erste Brillouinzelle durch,

$$E = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 |\vec{k} + \vec{K}|^2, \tag{1}$$

wobei $\vec{K}$ ein Vektor des reziproken Gitters ist, gegeben ist (dieser Ausdruck entspricht dem Limes $V \to 0$).

[a] Zeichne die Energiebänder entlang der Δ-Linie in Einheiten $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} K_0^2$, mit $K_0 = 2\pi/a$. Schreibe die Wellenfunktionen der ersten zwei Energieniveaus an den $\Gamma = (0,0,0)$ und $X = \frac{\pi}{a}(1,0,0)$ Punkten und entlang der Δ-Linie.

[b] Die Punktgruppe des Γ Punktes ist O_h. Bestimme die Transformationsregeln für die x, y und z Funktionen für je eine Operation in jeder Klasse von O_h. Bestimme dadurch die Charaktertabelle für die Wellenfunktionen. Bestimme die irreduzible Darstellungen der O_h, den die Wellenfunktionen bei Γ und $E = E_0$ gehören.

[c] Mache dasselbe für den X-Punkt (Punktgruppe D_{4h}) und die Δ-Linie (Punktgruppe C_{4v}).

[d] Nehme jetzt an, dass ein Realistisches Gitterpotential alle 'zufälligen' Entartungen aufspaltet. Verbinde die obige Betrachtungen und zeige wie sich die Aufspaltungen von Γ nach X entwickeln.

[e] Finde die zwei Wellenfunktionen beim X-Punkt mit $E = E_0/4$, die die irreduzible Darstellungen der entsprechende Punktgruppe bilden.

Betrachte nun ein Potential mit kubischer Symmetrie,

$$V(r) = V_0 + V \cos^2 \frac{\pi x}{a} \cos^2 \frac{\pi y}{a} \cos^2 \frac{\pi z}{a}. \tag{2}$$

Finde die Energielücke bei X und zeige, dass die obigen Zustände nicht durch das Potential koppeln.

[f] Betrachte die Zustände bei Γ, die der T_{2u} (Γ_4^- im Skript) Darstellung gehören, nämlich $\{\phi_x, \phi_y, \phi_z\} \equiv \{\sin K_0 x, \sin K_0 y, \sin K_0 z\}$. Zeige, dass sich die Matrixelemente der Spin-Bahn-Kopplung als,

$$\langle \phi_i | H_1 | \phi_j \rangle = i \frac{\hbar v K_0^2}{4m^2 c^2} \epsilon_{ijk} \sigma_k, \tag{3}$$

schreiben lassen, wobei $v = V_{\frac{2\pi}{a}(1,1,0)}$ und

$$H_1 = \frac{1}{4m^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{p}. \tag{4}$$

Diagonalisiere die Hamiltonianmatrice und finde die Eigenzustände. Vergleiche mit Gl. (1.41) des Skripts.

Aufgabe 2.2 Aufspaltung der Entartungen von Atomzuständen

Bestimme, wie sich die Energieniveaus der s, p, d und f-Zuständ des Ions aufspalten, wenn das Ion auf einem Punkt mit O_h-Symmetrie eines kubischen Kristalls liegt.

Aufgabe 2.3 *Auswahlregeln für Dipolübergänge

Linear polarisiertes Licht falle auf einen kubischen Kristall. Die Darstellungstheorie gibt uns ein gutes Werkzeug, um festzustellen, welche Übergänge erlaubt sind. Welche Übergänge sind für Wellenfunktionen der Symmetrie Γ_3^+ bzw. Γ_5^+ möglich?

Bemerkung: Die Operatoren $\widehat{O}_i = \vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_i$ gehören zur Darstellung Γ_4^-.