ETH
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

Festkörperphysik II
Serie 5

WS 06/07
Prof. G. Blatter

Aufgabe 5.1 Berechnung der effektiven Masse mit $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Störungstheorie

Für fast freie Elektronen im kubischen Gitter (Gitterkonstante a) in der Nähe des Γ-Punktes wollen wir effektive Massen der Bänder nahe bei $E = (2\pi/a)^2/2m$, $\hbar = 1$, bestimmen. Wir benutzen die Gruppentheorie, um geeignete Blochfunktionen beim Γ-Punkt zu finden, und verwenden die $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Methode in Störungstheorie zur Berechnung der Dispersionsrelation bis zur quadratischen Ordnung in $\mathbf{k}$.

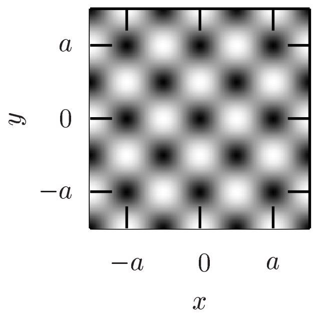

Abbildung 1: Dichtediagramm des periodischen Potential V, erzeugt durch Ionen auf einem kubischen Gitter mit Gitterkonstante a.

1. Die Bandstruktur freier Elektronen weist beim Γ-Punkt $E = (2\pi/a)^2/2m$ eine 6-fache Entartung auf. Bestimme die irreduziblen Darstellungen von O_h (inklusive Basisfunktionen), welche im periodischen Potential aufspalten. Als Ion-Potential sei

   $$V(x,y,z) = -U\Big[\cos(2\pi x/a)\cos(2\pi y/a)+\cos(2\pi y/a)\cos(2\pi z/a)+\cos(2\pi z/a)\cos(2\pi x/a)\Big]$$

   gegeben. Überzeuge dich davon, dass dieses Potential die kubische Symmetrie erfüllt. Berechne die Energieverschiebung der freien Elektronen in erster Ordnung und trage sie im Bandschema auf.

2. Wir wählen nun die obigen Basisfunktionen als gute Approximation der Blochfunktionen $\psi_{l,\mathbf{k}_0=0}$ am Γ-Punkt. In der $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Methode wird eine Blochfunktion $\psi_{\mathbf{k}}$ in der Nähe von $\mathbf{k}_0$ als Linearkombination (von orthogonalen Funktionen)

   $$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_l c_l e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\mathbf{r}}\psi_{l,\mathbf{k}_0}$$

   angesetzt, und damit der Hamiltonoperator in unserem Fall auf den 6-dimensionalen Unterraum eingeschränkt. Leite folgenden Ausdruck für die Matrixelemente von $\mathcal{H} = T + V$ bezüglich der Basisfunktionen $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\mathbf{r}}\psi_{l,\mathbf{k}_0}$ her,

   $$\mathcal{H}_{l',l} = \Big[\epsilon_{l,\mathbf{k}_0} + (\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/2m\Big]\delta_{l',l} + (\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\langle\psi_{l',\mathbf{k}_0}|\mathbf{p}/m|\psi_{l,\mathbf{k}_0}\rangle.$$

3. Beachte, dass eingeschränkt auf den 6-dimensionalen Unterraum das Potential exakt berücksichtigt ist. Zur Ermittlung der Bandstruktur am Γ-Punkt gehen wir störungstheoretisch in $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ vor. Wir betrachten ein beliebiges $\mathbf{k}$, d.h. eines, welches auf keiner Linie ausgezeichneter Symmetrie liegt. In mehrdimensionalen irreduziblen Darstellungen von Γ haben wir es mit entarteter Störungstheorie zu tun. In zweiter Ordnung erhalten wir die effektive Masse. Berechne die effektiven Massen in der k_x-k_y Ebene.

   Hinweis: Benutze zum Berechnen der Matrixelemente so oft wie möglich Symmetrieargumente.