

Vorbemerkung

Dies ist ein korrigierter Übungszettel aus dem Modul physik411.

Dieser Übungszettel wurde von einem Tutor korrigiert. *Dies bedeutet jedoch nicht, dass es sich um eine Musterlösung handelt. Weder ich, noch der Tutor implizieren, dass dieses Dokument keine Fehler enthält.*

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf <http://martin-ueding.de/de/university/physik411/> gefunden werden.

Sofern im Dokument nichts anderes angegeben ist: Dieses Werk von Martin Ueding ist lizenziert unter einer [Creative Commons Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz](#).

[disclaimer]


physik411 – Übung 10

Gruppe 2 – Florian Seidler

Martin Ueding *

2013-06-27

Lizenz: CC-BY-SA 3.0 

Aufgabe	1	2	3	Σ
Punkte	/ 14	/ 10	/ 16	 / 40

1. Die Brillouin-Zone

1a. Definition

Die erste Brillouin-Zone ist die primitive Wigner-Seitz-Zelle im reziproken Raum. [Wikipedia, 2013a] [Keyling, 2002, Kapitel 3.1, Seite 33]



1b. Konstruktion

Im reziproken Gitter:

- Punkt aussuchen
- Verbindung zu nächsten Nachbarn einzeichnen
- Mittelsenkrechten in die Verbindungen einzeichnen.
- Umschlossene Fläche ist erste Zone.



1c. Symmetrie

Die Bragg-Reflexion tritt immer auf, wenn $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{g}$, also ein beliebiger reziproker Gittervektor, ist. Der Bloch-Satz besagt, dass in der Welle ein Phasenfaktor auftritt: [Meschede, 2013, Vorlesung 16, Folie 7]

$$\exp(i \langle \mathbf{k}, \mathbf{t}_n \rangle), \quad \langle \mathbf{t}_n, \mathbf{g}_m \rangle = 2\pi n$$

*mu@uni-bonn.de

Wenn also eine Transformation $\mathbf{k}' := \mathbf{k} + \mathbf{g}$ durchgeführt wird, ändert sich die Phase gerade nicht. Somit sind die Zonen zueinander äquivalent. 

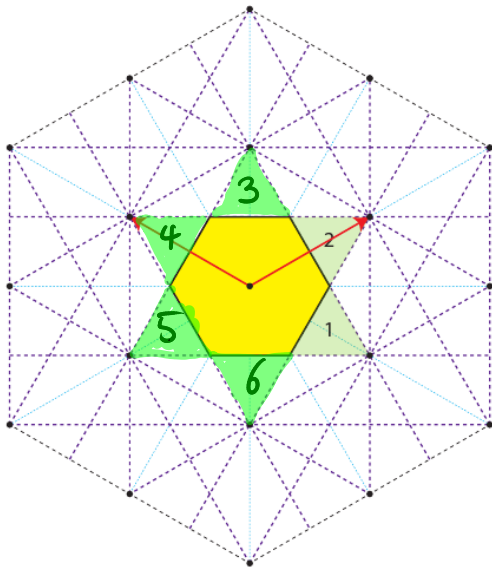
1d. Äquivalente Zonen

Die Zonen habe ich per Hand in die gegebene Abbildung gemalt, siehe nächste Seite.

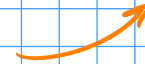
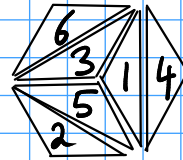
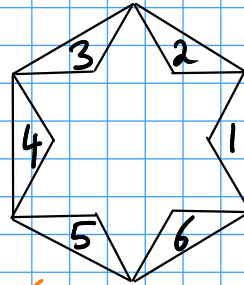
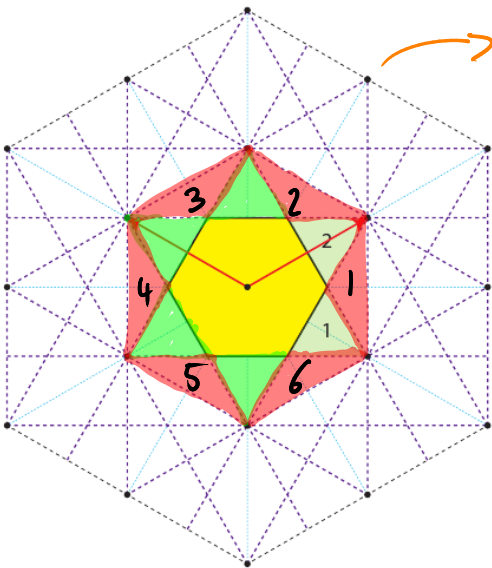
Dabei habe ich jedoch nur $6 + 6 + 6 = 18$ Maschen eingezeichnet. Die Sechsecke sind allerdings komplett belegt. Wo ist da der Fehler?



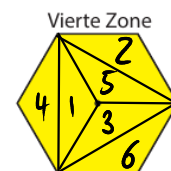
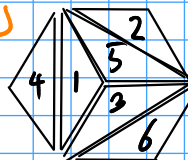
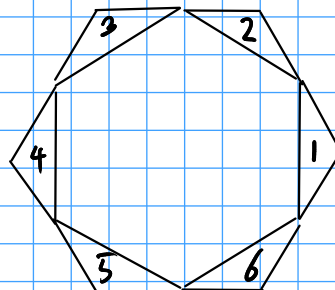
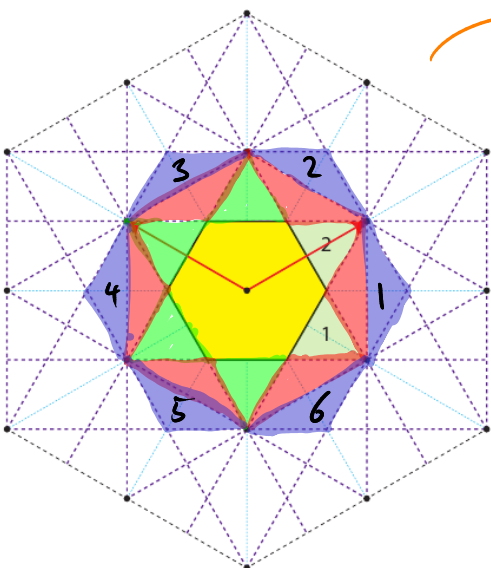
d) Zweite Zone:



Dritte Zone:



Vierte Zone:



2. Edelmetalle

2a. Bravaisgitter

Kupfer ist „cubic-close-packed“, also ccp. [Winter, 2012] Laut [Wikipedia, 2013b] ist es fcc.



2b. Erste 3D Zone

Die erste Zone von einem fcc Gitter ist ein Oktaederdrittelstumpf. [Akopian, 2000]

Einige der Hochsymmetriepunkte habe in in Abbildung 1 eingezeichnet. [Keyling, 2002, Kapitel 3.1, Seite 33]

Alle Punkte sind in Abbildung 2, das ich später auch noch gefunden habe.



2c. Hybridisierungstypen

Hier fehlen noch Inhalte.



3. Optische Gitter und Tight-Binding-Methode

3a. Oszillatorfrequenz

Gegeben ist das Potential:

$$\hat{V}(x) = \frac{U_0}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi}{a} x \right) \right)$$

Ein Minimum ist bei $x = 0$. Darum entwickle ich die Funktion und erhalte:

$$\hat{V}(x) = U_0 \frac{\pi^2}{a^2} x^2 + \mathcal{O}(x^3)$$

Ein Koeffizientenvergleich mit $U(x) = m\omega^2 x^2 / 2$ liefert:

$$\omega^2 = 2U_0 \frac{\pi^2}{a^2 m}$$



3b. Bedingung an Potentialtiefe

Das Δx sieht nach dem FWHM für die Wellenfunktion des Zustandes $|0\rangle$ des harmonischen Oszillators aus. Nach [Kubis & Urbach, 2013, Übersichtsfolie 17] ist das:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right)$$

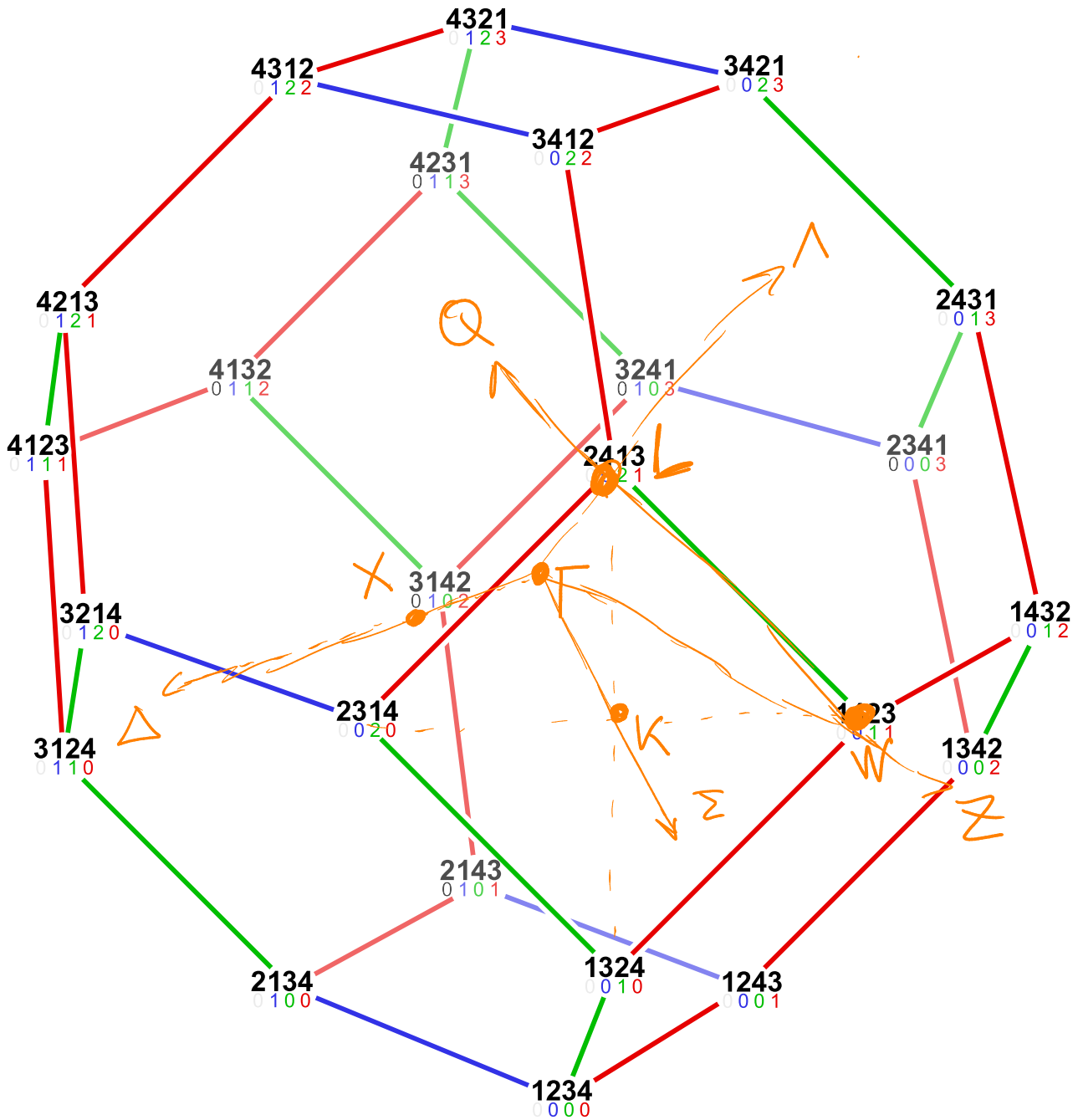


Abbildung 1: Hochsymmetriepunkte. Die Hintergrundzeichnung stammt aus [Mate2code, 2011]

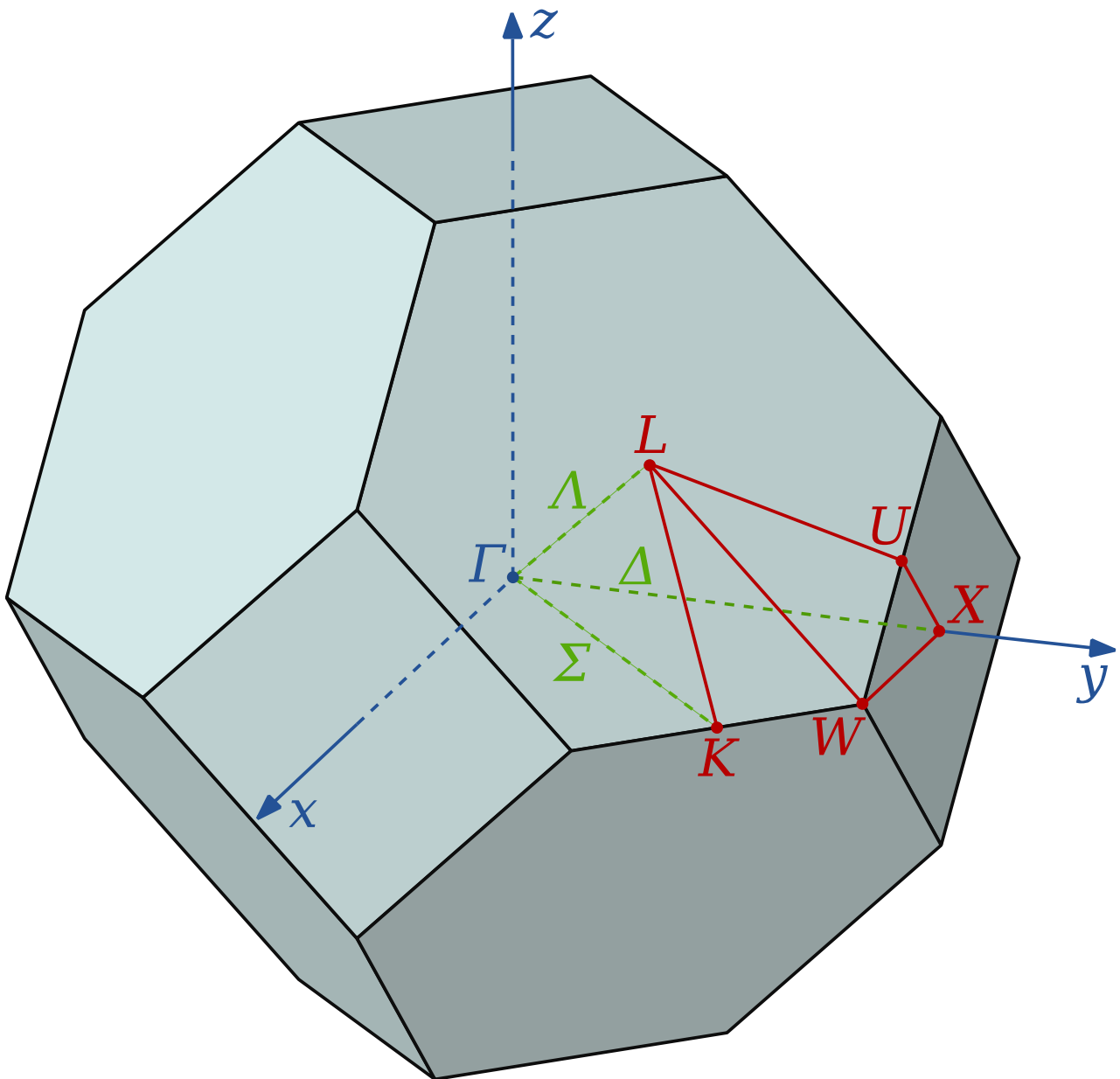


Abbildung 2: Alle Hochsymmetriepunkte der ersten Brillouinzone des fcc Gitters. [Inductiveload, 2008]

Die halbe Höhe ist erreicht, wenn:

$$x = \pm \sqrt{\frac{2\hbar \ln(2)}{m\omega}}$$

Somit ist

$$\Delta x = 2\sqrt{\frac{2\hbar \ln(2)}{m\omega}}$$

Dies soll jetzt deutlich kleiner als a sein. Nach drei Umformungen und dem Einsetzen des gefundenen ω erhalte ich:

$$32 \frac{\hbar^2 \ln^2(2) a^2 m}{\pi^2} \ll U_0$$



3c. Diagonalisieren

Gegeben ist:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E & J \\ J & E \end{pmatrix}$$

Ich suche die Eigenvektoren, diese sind:

$$e_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad e_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Somit kann ich die Eigenzustände schreiben als:

$$|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e_2 \quad |e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e_1$$



3d. Skizze

Die Skizze der komplizierten Formel, deren Herleitung gar nicht so wichtig ist, ist in Abbildung 3.



3e. Tunnelrate durch Barriere

Hier fehlen noch Inhalte.



3f. Translationsinvariante Matrixform

Die Funktion ψ_k erfüllt das Bloch-Theorem. Der reziproke Gitterbasisvektor ist $g = 2\pi/a$. Eine Translation im k -Raum um $k \mapsto k + g$ führt in der Exponentialfunktion zur Addition von $2\pi i$, so dass nichts verändert

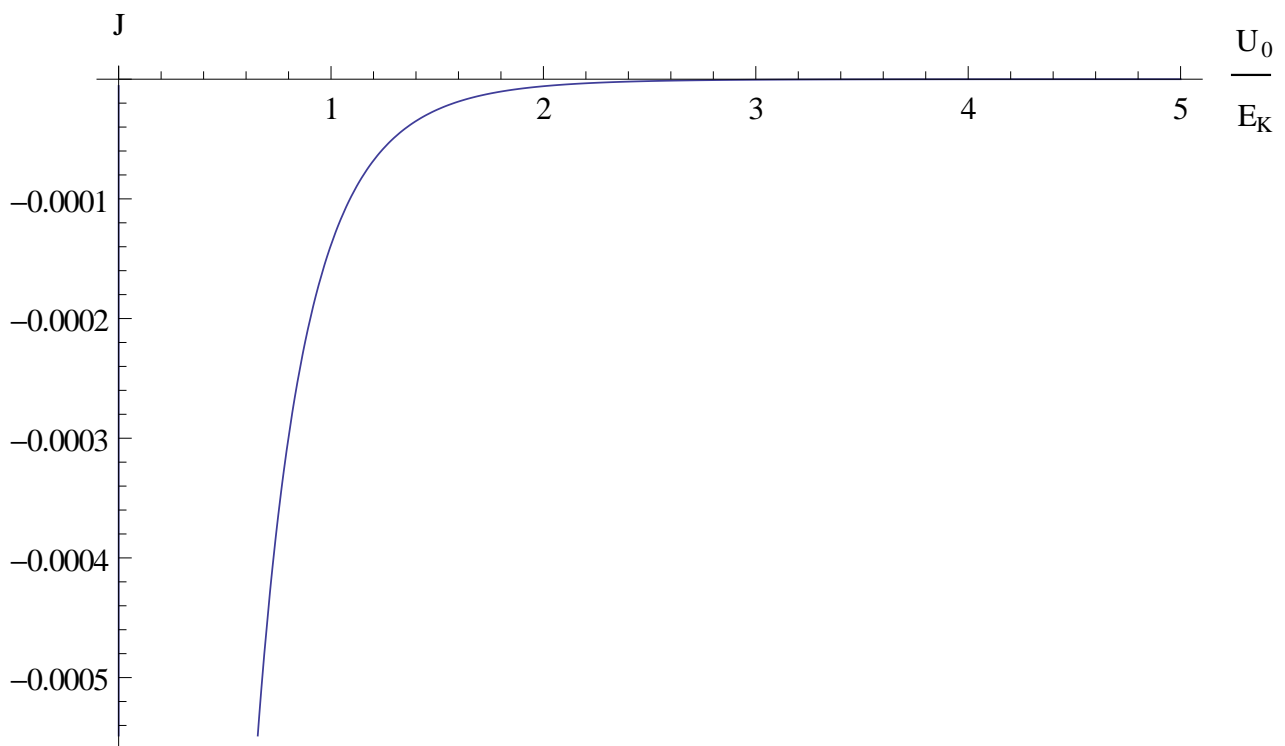


Abbildung 3:

wird.

ψ_0 ist die Wellenfunktion vom Oszillator an der Position 0. Die Funktion ψ_k kann in der Basis der ψ_n dargestellt werden als:

$$\psi_k = \begin{pmatrix} \vdots \\ \exp(-2ika) \\ \exp(-ika) \\ 1 \\ \exp(ika) \\ \exp(2ika) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Wenn ich nun den Hamiltonoperator darauf anwende, erhalte ich:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ J \exp(-2ika) + E_0 \exp(-ika) + J \\ J \exp(-ika) + E_0 + J \exp(ika) \\ J + E_0 \exp(ika) + J \exp(2ika) \\ \vdots \end{pmatrix} = (J \exp(ika) + E_0 + J \exp(-ika)) \begin{pmatrix} \vdots \\ \exp(-2ika) \\ \exp(-ika) \\ 1 \\ \exp(ika) \\ \exp(2ika) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Somit ist der Energieeigenwert:

$$J \exp(ika) + E_0 + J \exp(-ika) = E_0 + 2J \cos(ka)$$



3g. Effektive Masse

Gegeben ist in der vorherigen Aufgabe:

$$E = E_0 + 2J \cos(ka)$$

Dies leite ich zweimal nach k ab, invertiere es und erhalte:

$$m_{\text{eff}} = -\frac{\hbar}{2Ja^2}$$

Da J negativ ist (siehe Abbildung 3), ist die Masse auch positiv.



Literatur

- [Akopian, 2000] Akopian, N. (2000). Brillouin Zones. http://phycomp.technion.ac.il/~nika/brillouin_zones.html.
- [Inductiveload, 2008] Inductiveload (2008). Brillouin Zone (1st, FCC). [https://en.wikipedia.org/wiki/File:Brillouin_Zone_\(1st,_FCC\).svg](https://en.wikipedia.org/wiki/File:Brillouin_Zone_(1st,_FCC).svg).
- [Keyling, 2002] Keyling, R. (2002). *Ab-initio Berechnung der ultraschnellen Dynamik angeregter Elektronen in Volumen- und Oberflächenzuständen von Metallen*. PhD thesis, FU Berlin. http://www.diss.fu-berlin.de/diss/receive/FUDISS_thesis_000000000707.
- [Kubis & Urbach, 2013] Kubis, B. & Urbach, C. (2013). physik421 – Theoretische Physik 3 – Quantenmechanik.
- [Mate2code, 2011] Mate2code (2011). Symmetric group 4; permutohedron 3D; permutations and inversion vectors. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Symmetric_group_4;_permutohedron_3D;_permutations_and_inversion_vectors.svg.
- [Meschede, 2013] Meschede, D. (2013). physik411 Vorlesung.
- [Wikipedia, 2013a] Wikipedia (2013a). Brillouin-Zone. <https://de.wikipedia.org/wiki/Brillouin-Zone>.
- [Wikipedia, 2013b] Wikipedia (2013b). Copper. <https://en.wikipedia.org/wiki/Copper>.
- [Winter, 2012] Winter, M. (2012). Copper: crystal structure. http://www.webelements.com/copper/crystal_structure.html.