Aufgabe 3.1 Bandstruktur des einfach tetragonalen Gitters

Wir wollen die Bandstruktur von fast freien Elektronen in einem Kristall tetragonaler (D_4) Symmetrie studieren. Das reziproke Bravaisgitter des einfach tetragonalen Gitters ist wieder ein solches, die Basisvektoren seien $\mathbf{b}_1 = (1, 0, 0)$, $\mathbf{b}_2 = (0, 1, 0)$ und $\mathbf{b}_3 = (0, 0, 2)$ (in Einheiten von $2\pi/a$).

i) Der Stern von $\mathbf{k}$ ist die Menge der Vektoren, die durch die Symmetrietransformationen der Punktgruppe (D_4) angewandt auf $\mathbf{k}$ entstehen. Wieviele Vektoren enthält der Stern zu $\mathbf{k}$ auf den Punkten Γ, X, Z, und auf den Linien Δ und Λ ?

ii) Welche kleine Punktgruppen (reduzierter Symmetrie) gehören zu $\mathbf{k}$ auf Γ, Δ, X, Λ, Z ? Bestimme die zugehörigen Charaktertafeln. Welche Beziehung besteht zwischen der Zahl der Elemente dieser Gruppe und der Anzahl der Vektoren des Sterns?

iii) Erstelle das Bandschema von freien Elektronen auf den Linien $\Gamma - \Delta - \mathrm{X}$ und $\Gamma - \Lambda - \mathrm{Z}$ auf für die Energien $E = \hbar^2(\mathbf{K}_j + \mathbf{k})^2/2m < 5\,(2\pi\hbar/a)^2/2m$, $\mathbf{k} \in 1.$ BZ, $\mathbf{K}_j$ ein reziproker Gittervektor. Bestimme die Darstellungen und die Entartungen. Berücksichtige die Kompatibilität.

iv) Welche Aufspaltungen ergeben sich für fast freie Elektronen, d.h. beim Einschalten eines (schwachen) periodischen Potentials? Welches sind die geeigneten Basisfunktionen dieser Darstellungen, welche z.B. für eine störungstheoretische Rechnung dienen mögen? Gib sie für die $\Gamma - \Delta - \mathrm{X}$ Linie explizit an. Diskutiere im Detail die Aufhebung der Entartung am Bandrand (Γ, X), sowie die Hybridisierung der Schnittpunkte der Bänder mit gleicher Symmetrie. Unter der Annahme eines abstossenden Potentials, mache eine qualitative Aussage über die Richtung der Aufspaltungen.

Aufgabe 3.2 Irreduzible Darstellungen der Raumgruppe

Mit $D^{\alpha,k}$ bezeichnen wir die irreduziblen Darstellungen der kleinen Gruppe mit den Basiszuständen $\psi_k^1 \ldots \psi_k^{l_\alpha}$. Zeige dass dann $\psi_{k'}^j$ mit k' im Stern von k und $1 \leq j \leq l_\alpha$ die Basis einer irreduziblen Darstellung der Raumgruppe ist mit der Dimension $s_k l_\alpha$ (s_k bezeichne die Anzahl Vektoren im Stern von k). Zeige weiter

$$\sum_{k \in \text{red. BZ}} \sum_{\alpha} (s_k l_\alpha)^2 = Ng.$$

Somit erhalten wir durch obige Konstruktion sämtliche irreduziblen Darstellungen der Raumgruppe. (Siehe Skript Kap. 2.8 für eine ausführliche Diskussion.)