Aufgabe 14.1

a) Im fcc-Gitter gibt es 12 nächste Nachbarn an den Positionen:

$$r_j = \quad \frac{a}{2}\{0, \pm 1, \pm 1\}, \quad \frac{a}{2}\{\pm 1, 0, \pm 1\}, \quad \frac{a}{2}\{\pm 1, \pm 1, 0\} \tag{1}$$

Daraus folgt:

$$\sum_j \exp[\mathbf{i}kr_j] = e^{\frac{1}{2}ia(-k_x-k_y)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_x-k_y)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_y-k_x)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_x+k_y)} \tag{2}$$

$$+ e^{\frac{1}{2}ia(-k_x-k_z)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_x-k_z)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_z-k_x)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_x+k_z)} \tag{3}$$

$$+ e^{\frac{1}{2}ia(-k_y-k_z)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_y-k_z)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_z-k_y)} + e^{\frac{1}{2}ia(k_y+k_z)} \tag{4}$$

$$= 2\left(e^{-\frac{1}{2}iak_x} + e^{\frac{1}{2}iak_x}\right)\left(\frac{1}{2}\left(e^{-\frac{1}{2}iak_y} + e^{\frac{1}{2}iak_y}\right) + \frac{1}{2}\left(e^{-\frac{1}{2}iak_z} + e^{\frac{1}{2}iak_z}\right)\right) \tag{5}$$

$$+ \left(e^{-\frac{1}{2}iak_y} + e^{\frac{1}{2}iak_y}\right)\left(e^{-\frac{1}{2}iak_z} + e^{\frac{1}{2}iak_z}\right) \tag{6}$$

$$= 4\cos\frac{ak_x}{2}\left(\cos\frac{ak_y}{2} + \cos\frac{ak_z}{2}\right) + 4\cos\frac{ak_y}{2}\cos\frac{ak_z}{2} \tag{7}$$

Und somit:

$$E(\vec{k}) = E^l - 4\beta\left[\cos\frac{ak_x}{2}\left(\cos\frac{ak_y}{2} + \cos\frac{ak_z}{2}\right) + \cos\frac{ak_y}{2}\cos\frac{ak_z}{2}\right] \tag{8}$$

$E(\vec{k})$ wird minimal, sofern alle cos Terme $+1$ ergeben. Das Maximum folgt wenn die eckige Klammer -1 ergibt, was für verschiedene Kombinationen erreicht werden kann (z.B. $\cos\frac{ak_i}{2} = \{-1, 1, 1\}$). Es folgt:

$$W = E(k_{\text{max}}) - E(k_{\text{min}}) = 4\beta - (-4\beta)[3] = 16\beta \tag{9}$$

b) Taylorentwicklung von (8) durch stures Einsetzen ergibt:

$$E(\vec{k}) = E^l - 4\beta\left[3 - \frac{1}{4}a^2k_x^2 + k_z^2\left(\frac{1}{64}a^4k_x^2 + \frac{1}{64}a^4k_y^2 - \frac{a^2}{4}\right) + k_y^2\left(\frac{1}{64}a^4k_x^2 - \frac{a^2}{4}\right)\right] \tag{10}$$

$$= E^l - 4\beta\left[3 - \frac{1}{4}a^2k^2 + \mathcal{O}(k^4)\right] \tag{11}$$

$$= E^l + \beta a^2k^2 - 12\beta \tag{12}$$

Wobei der zweite Summand der kinetische Term ist, durch Vergleich erhält man:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = \beta a^2, \quad \Rightarrow \quad m^* = \frac{\hbar^2}{2\beta a^2} \tag{13}$$

c)

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} = 0.423\,\text{eV}, \quad \Rightarrow \quad W = 6.77\,\text{eV} \tag{14}$$

Aufgabe 14.2

a) Es folgt als vereinfachte Form:

$$E(\vec{k}) = E_0 - 2\beta_2\cos k_2a_2 \tag{15}$$

b) Man erwartet die auch erhaltene 2π-Periodizität von k_2a_2.

c) Durch Betrachtung von (15) sieht man leicht, dass $W = 4\beta_2$, entsprechend ist $\beta_2 = 0.11\,\mathrm{eV}$

d)

$$E(\vec{k}) \approx E_0 - 2\beta_2 \left[1 - \frac{1}{2}a_2^2 k_2^2\right] \tag{16}$$

$$= E_0 + \beta_2 a_2^2 k_2^2 - 2\beta_2 \tag{17}$$

Damit ist $\frac{\hbar^2}{2m^*} = \beta_2 a_2^2$ und damit $m^* = \frac{\hbar^2}{2\beta_2 a_2^2} = 6.108 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg} = 0.67\,m_e$.