

❶ Das 'Squarium', ein quadratisches Netz aus Atomen, ist ein einfaches zweidimensionales Modellsystem zur Ableitung der LCAO-Beschreibung im Festkörper.

(a) Zeichnen Sie die reale Struktur und die reziproke  $k$ -Ebene mit den speziellen Punkten  $\Gamma$ , X und M.

(b) Skizzieren Sie die Bandstruktur (Pfad  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$ ) der Bänder, die sich durch Linearkombination der  $d_{xy}$ - und der  $d_{x^2-y^2}$ -Atomorbitale ergeben (s. (c)).

(c) Begründen Sie den Bandverlauf anhand der 'Molekülorbitale', die zu den jeweiligen speziellen Punkten gehören. Welcher Bindungscharakter liegt jeweils vor?

AO	$\Gamma$ (0,0,0)	X (0,0, $\frac{1}{2}$ )	M ( $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ )
$d_{xy}$			
$d_{x^2-y^2}$			

- ② Die Abbildung 2.2.5.5. auf der Web-Seite zeigt die Bandstruktur von  $\alpha$ -Sn (Diamantstruktur).
- (a) Wie viele Atome befinden sich in der bei der Rechnung berücksichtigten Elementarzelle?
- (b) Wie viele Atome befinden sich in der üblichen Zeichnung der kubischen Elementarzelle? Die Relation ist die übrigens gleich der zwischen einer flächenzentrierten ( $F$ ) und einer primitiven ( $P$ ) Elementarzelle!
- (c) Erklären Sie die Bandverläufe, nur ausgehend von  $\Gamma$ -Punkt. Welche Orbitale mit welcher Art/Symmetrie der Wechselwirkung stecken also hinter den Bändern?
- (d) In welchen Punkten unterscheiden sich die Bandstrukturen der isotypen Elemente  $\alpha$ -Sn und Silicium (s. Tab. 2.2.5.1 dazu, beachten sie das (i)!).
- (e) Wie wirken sich diese Unterschiede auf die physikalischen Eigenschaften aus?