

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 Γ , 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	Γ (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 α -Sn (Diamantstruktur). (Wie sich die 1. BZ erklären läßt, das kommt nochmal in einem kleinen Video).
- (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 Γ -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 α -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?