

- ❶ Das 2D-Modellsystem **Squarium** kann man mit dem Programm *qm2dcrystal* (s. Web-Seite) selber 'erforschen' (s. dazu auch das kleine Video).
- (a) Skizzieren Sie die reziproke Fläche im erweiterten Zonenschema und markieren Sie die ersten 3 Brillouin-Zonen, die reziproken Gitterpunkte sowie den Pfad Γ -X-M- Γ in der 1. BZ.
- (b) Plotten Sie mit dem genannten Programm die Bandstruktur für (a) 'potential rectangular wells' und (b) 'free particle' und übertragen Sie die untersten drei Bänder in einen 'Spaghetti-Plot' (dem o.g. Pfad folgend). Wie lassen sich die Unterschiede von (a) und (b) erklären?
- (c) Zeichnen Sie für diese drei Bänder (mit Einstellung 'potential rectangular wells') den Verlauf der Vorzeichen der PW in der Nähe des Punktes X im Realraum (z.B. 4x6 Elementarzellen). Welche Wellenlängen λ_x und λ_y haben die PW?

(d) Skizzieren Sie analog die Vorzeichenverläufe für die untersten sechs Bänder am Γ -Punkt. Welchen Atom-Orbitale entsprechend – bzgl. Vorzeichenwechsel und Symmetrie – diese sechs Bänder? (! Das Atom liegt hier in der Mitte der Zelle! Vergleich mit der LCAO-Lösung).

(e) Wie begründen sich Verlauf und Entartung für diese sechs Bänder, wenn man von Γ nach X läuft? Betrachten Sie dazu die Orbitale aus (d) bezüglich σ - und π -Bindungen.

② Vom Element **Calcium** wissen wir aus den vergangenen Übungen, dass es polymorph ist. Wie läßt sich die Polymorphie gerade bei diesem Element begründen?