

Ebene Wellen mit Wellenvektoren aus unterschiedlichen Brillouinzonen

Illustration

Wir vergleichen zwei ebene Wellen, deren Wellenvektoren sich um einem reziproken Gittervektor unterscheiden, d.h. wir vergleichen die Funktionen

$$\psi_1(\underline{r}, t) = A \cdot \exp[i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}] \cdot \exp[i \cdot \omega \cdot t]$$

$$\psi_2(\underline{r}, t) = A \cdot \exp[i \cdot (\underline{k} + \underline{G}) \cdot \underline{r}] \cdot \exp[i \cdot \omega \cdot t]$$

- Dabei wählen wir für den Wellenvektor der ersten Welle $\psi_1(\underline{r}, t)$ einen \underline{k} -Vektor aus der 1. BZ. Für die 2. Welle kann die BZ frei gewählt werden, wobei dann ein entsprechender reziproker Gittervektor \underline{G} addiert wird.

Was der Modul zeigt, dass jeweils an den Stellen \underline{r}_a im Realraum, an denen Gitterpunkte liegen, beide Wellen immer den gleichen Wert haben. d.h. $\psi_1(\underline{r}_a, t) = \psi_2(\underline{r}_a, t)$.

- Vom Gitter aus betrachtet, sind die beiden Wellen also nicht zu unterscheiden.
- Sie haben aber trotzdem sehr unterschiedliche Energien. Zurückgefaltet in die 1. BZ sind dies dann die Energien der höheren Bänder. Dies ist leicht einzusehen anhand der Beziehung

$$e^{i \cdot \underline{G} \cdot \underline{r}} = e^{i \cdot 2 \pi \cdot n} = 1$$

Hier der Java-Modul.

- Die Rechnung kann etwas dauern, bitte nicht ungeduldig werden.

Number of BZ:

