

Frankfurt, 15.04.2019

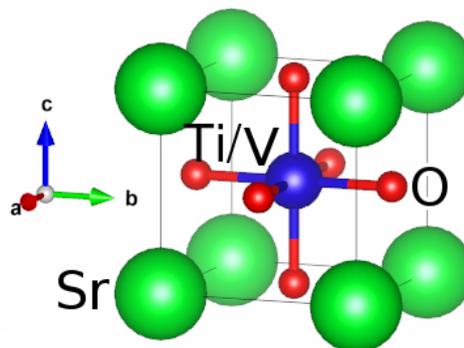
Theorie zu Magnetismus, Supraleitung und Elektronische Korrelation in
 Festkörpern
 Sommersemester 2019

Blatt 1

(Abgabe: 23.04.2019)

Aufgabe 1 (Tight Binding Modell für SrTiO_3 and SrVO_3) (10 Punkte)

Gegeben sei die einfache kubische Kristallstruktur von SrTiO_3 und SrVO_3 mit Gitterparameter $a = 3.905 \text{ \AA}$.



SrTiO_3 / SrVO_3 haben die nominale Elektronenkonfiguration $3d^0$ / $3d^1$, d.h. die Titanium/Vanadium $3d$ Orbitale befinden sich am Fermi-niveau und sind jeweils mit 0 bzw. 1 Elektronen besetzt. Dabei wird durch das Crystal Field Splitting die Entartung der $3d$ Orbitale aufgehoben, welche sich in die energetisch tieferliegenden 3-fach entarteten t_{2g} ($3d_{xy}$, $3d_{xz}$, $3d_{yz}$) und 2-fach entarteten e_g ($3d_{z^2}$, $3d_{x^2-y^2}$) Orbitale separieren.

- Wir wollen nun ein Tight Binding Modell für die 3 t_{2g} Orbitale unter Berücksichtigung von Nearest-Neighbour-hopping konstruieren. Begründen Sie, warum ein Onsite Term und 2 weitere Hopping Integrale ausreichend für das Modell sind.
- Konstruieren Sie den fouriertransformierten Hamiltonian in der Orbitalbasis $H_{a,b}(\vec{k})$ mit den folgenden Hoppingparametern:

$$\begin{aligned} \text{Onsite : } & t_{xy \rightarrow xy} = t_0, \quad t_{xz \rightarrow xz} = t_0, \quad t_{yz \rightarrow yz} = t_0 \\ \text{Hopping in x-Richtung : } & t_{xy \rightarrow xy} = t_1, \quad t_{xz \rightarrow xz} = t_1, \quad t_{yz \rightarrow yz} = t_2 \\ \text{Hopping in y-Richtung : } & t_{xy \rightarrow xy} = t_1, \quad t_{xz \rightarrow xz} = t_2, \quad t_{yz \rightarrow yz} = t_1 \\ \text{Hopping in z-Richtung : } & t_{xy \rightarrow xy} = t_2, \quad t_{xz \rightarrow xz} = t_1, \quad t_{yz \rightarrow yz} = t_1 \end{aligned}$$

Wie lauten die Dispersionsrelationen für die Orbitale?

- Verwenden Sie $t_0 = 1.6100 \text{ eV}$, $t_1 = -0.2797 \text{ eV}$ und $t_2 = -0.032061 \text{ eV}$ und plotten Sie die Bandstruktur entlang des Pfades $(0, 0, 0) \rightarrow (\pi, 0, 0) \rightarrow (\pi, \pi, 0) \rightarrow (0, 0, 0)$.
- Argumentieren Sie, wo bei SrTiO_3 / SrVO_3 jeweils das Fermi-niveau (ungefähr) liegt, und treffen Sie eine Aussage zu den metallischen Eigenschaften der Systeme.