

Frankfurt, 06.01.2020

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2019/20

Blatt 10

(Abgabe: 20.01.2020)

Aufgabe 1 (Fermistatistik bei Raumtemperatur) (5 Punkte)

Die Fermitemperatur von Kupfer beträgt ca. 81000 K. Berechnen Sie den Anteil von thermisch anregbaren Leitungselektronen, d.h. Elektronen, deren Energie bei Raumtemperatur (300 K) größer ist als $E_F - 2k_B T$ (E_F ist die Fermienergie).

Hinweis: Betrachten Sie die Leitungselektronen als freies Elektronengas, der Ausdruck für die Zustandsdichte kann aus dem Skript übernommen werden. Die Aufgabe kann durch partielle Integration gelöst werden, wobei Sie annehmen können, dass die Ableitung der Fermifunktion für den hier betrachteten Fall kleiner Temperaturen eine Deltafunktion ist.

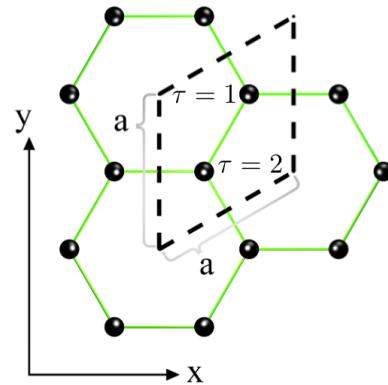
Aufgabe 2 (Elektronische Eigenschaften im Honigwabengitter) (10 Punkte)

Wir betrachten einen Kristall, der in einem zweidimensionalen Honigwabengitter angeordnet ist. Die Einheitszelle des Kristalls (siehe Figur) beinhaltet zwei Atome.

Dieses System kann mit dem Modell-Hamiltonian

$$(1) \quad H = \sum_{\tau \vec{R}} \varepsilon_0 |\tau \vec{R}\rangle \langle \tau \vec{R}| + \sum_{\tau \tau'} \sum_{\vec{R} \vec{R}'} t_{\vec{R} \vec{R}'}^{\tau \tau'} |\tau \vec{R}\rangle \langle \tau' \vec{R}'|$$

beschrieben werden, wobei $\tau = 1, 2$ die Basisatome durchnummert und über die Gittervektoren \vec{R}, \vec{R}' summiert wird. Die Wannierfunktionen $|\tau \vec{R}\rangle$ sind orthogonal: $\langle \tau \vec{R} | \tau' \vec{R}' \rangle = \delta_{\vec{R} \vec{R}'} \delta_{\tau \tau'}$.



- a) Berechnen Sie die Dispersionsrelation für den Kristall unter der Annahme, dass Hüpfen nur zwischen nächsten Nachbarn mit Amplitude t stattfindet. Benutzen Sie das angegebene Koordinaten- system.

Hinweis: Sie können wieder die Blochfunktionen

$$|\tau \vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} |\tau \vec{R}\rangle$$

als Ansatz benutzen. Berechnen Sie $H|\tau'' \vec{k}\rangle$ und diagonalisieren Sie anschließend die resultierende 2×2 Matrix, um die Energiedispersion in Abhängigkeit des Impulses zu bestimmen.

- b) Zeichnen Sie die Bandstruktur entlang des Pfades von $\Gamma = (0, 0)$ bis $K = (\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a})$ für $\varepsilon_0 = 0$ und $t = 1$.
c) Berechnen Sie außerdem numerisch die Zustandsdichte und die Fermifläche für $\epsilon_0 = 0$ und $t = 1$.