Goethe-Universität Frankfurt
Fachbereich Physik

Lehrende: Prof. Dr. Roser Valentí, Raum 01.130
Übungsgruppenleitung: Karim Zantout, Room 01.142

Frankfurt, 13.12.2019

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2019/20

Blatt 9

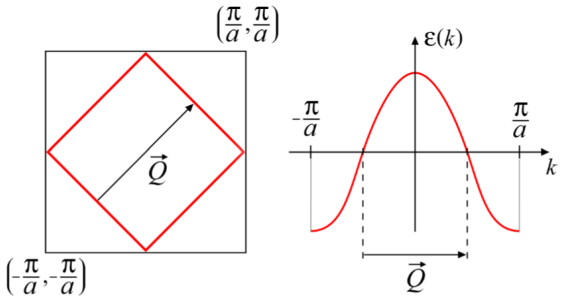
(Abgabe: 13.01.2020)

Aufgabe 1 (**Fermi surface nesting**) (5 Punkte)

Fermi surface nesting beschreibt die Situation, in der Teile der Fermifläche durch Verschieben um einen Vektor $\vec{Q}$ in einen anderen Teil der Fermifläche überführt werden können,

$$\varepsilon_F(\vec{k}) = \varepsilon_F(\vec{k} + \vec{Q}). \tag{1}$$

Dies kann zu einer Instabilität des Systems gegenüber magnetischer Ordnung führen; z.B. begünstigt der Nestingvektor $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ in zwei Dimensionen eine antiferromagnetische Ordnung der magnetischen Momente (Néel-Zustand).



Die Energiedispersion des Tight-Binding-Modells des kubischen Gitters mit nächster-Nachbar-Hüpfen wird für d Dimensionen beschrieben durch

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_0 + 2t \sum_{i=1}^{d} \cos(k_i a). \tag{2}$$

Bei halber Füllung führt dies in beliebiger Dimension zu Fermi surface nesting. Erst durch die Berücksichtigung von Hüpfen zwischen übernächsten Nachbarn t' kann das Nesting aufgehoben werden. Im speziellen Fall des eindimensionalen Modells ist das Nesting bis zu einer kritischen Hüpfamplitude von $(t'/t)^{(c)}$ erhalten. Jenseits dieses kritischen Werts kann, in einer Dimension, kein einzelner Vektor gefunden werden, der die Fermifläche in sich selbst überführt.

a) Geben Sie die Dispersionsrelation des eindimensionalen Tight-Binding-Modells mit bis zu übernächstem-Nachbar-Hüpfen im kubischen Gitter an.

b) Bestimmen Sie die kritische Hüpfamplitude $(t'/t)^{(c)}$ für halbe Füllung.
Hinweis: Plotten Sie dafür die Dispersionrelation für verschiedene Verhältnisse der Hüpfparameter. Überlegen Sie sich anschließend jeweils die Position der Fermienergie anhand der Formel für die Elektronenanzahl pro Band $N_e = \frac{1}{N} \sum_{\sigma \vec{k}} \Theta(E_F - \varepsilon(\vec{k}))$.

Aufgabe 2 (**Sommerfeld-Entwicklung**) (5 Punkte)

Die Zustandsdichte für freie Elektronen in zwei Dimensionen kann durch eine Stufenfunktion beschrieben werden,

$$\rho(E) = \begin{cases} \frac{V}{N}\frac{m}{\pi\hbar^2} & E \geq 0 \\ 0 & E < 0. \end{cases}$$

a) Leiten Sie daraus ab, dass in zwei Dimensionen alle temperaturabhängigen Terme der Sommerfeld-Entwicklung für die Teilchenzahl verschwinden. Zeigen Sie, dass sich daraus $\mu = E_F$ für alle Temperaturen ergibt.

b) Wir wollen nun auf einem anderen Weg zum chemischen Potential gelangen. Ermitteln Sie die Elektronenzahl aus der Zustandsdichte ohne Sommerfeld-Entwicklung und zeigen Sie, dass

$$\mu + k_B T \ln(1 + e^{-\frac{\mu}{k_B T}}) = E_F$$

gilt. Was bedeutet das Ergebnis für die Sommerfeld-Entwicklung in zwei Dimensionen?
Hinweis: Das folgende Integral könnte hilfreich sein,

$$\int dx \frac{1}{e^x + 1} = x - \ln(e^x + 1).$$

Aufgabe 3 (**Effektive Masse**) (5 Punkte)

Wir betrachten ein Band mit zweidimensionaler Tight-Binding Dispersion,

$$E(\vec{k}) = E_0 - 2t\cos(k_x a) - 2t\cos(k_y a)$$

mit $t > 0$. Berechnen Sie die effektive Masse der beweglichen Elektronen für die Fälle, dass

a) das Band fast leer ist.

b) das Band fast vollständig gefüllt ist.

Interpretieren Sie die Ergebnisse.

Frohe Festtage und einen guten Rutsch ins neue Jahr!