Theoretische Festkörperphysik

Prof. F. Wegner, Universität Heidelberg, WS 05/06

5. Lösungsblatt
Abgabe Mittwoch, 30.11.05 zu Beginn der Vorlesung

9) Für die Entropie S eines wechselwirkungsfreien Fermigases mit Einteilchenzuständen i fanden wir

$$S = k_\mathrm{B} \sum_i s_i, \quad s_i = -f_i \ln f_i - (1-f_i)\ln(1-f_i),$$

wobei $f_i = f(\epsilon - \mu)$ die Fermi-Funktion ist.
a) Man diskutiere s als Funktion der Einteilchenenergie. (2 P.)

Lösung: Für $s(\epsilon)$ ergibt sich

$$s(\epsilon) = \frac{1}{1+\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}} \ln(1+\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}) + \frac{1}{1+\mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)}} \ln(1+\mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)}).$$

Im Limes $\beta(\epsilon-\mu) \to \pm\infty$ verschwindet s wie

$$\begin{aligned} \beta(\epsilon-\mu) &\to +\infty \qquad s \approx \frac{1+\beta(\epsilon-\mu)}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}}, \\ \beta(\epsilon-\mu) &\to -\infty \qquad s \approx \frac{1-\beta(\epsilon-\mu)}{\mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)}}. \end{aligned}$$

Weiter hat man $s(\epsilon = \mu) = \ln 2$ und

$$\frac{\partial s}{\partial \epsilon} = \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \ln \frac{1-f}{f} = -\frac{\beta^2(\epsilon-\mu)\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}}{(1+\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)})^2}$$

Hieraus sieht man, dass das Maximum von s bei $\epsilon = \mu$ liegt und die Funktion nach beiden Seiten monoton auf 0 abfällt.

b) Man gebe die Entropie als Funktion der Temperatur an, wenn man konstante Zustandsdichte $D(\epsilon)$ annimmt. (Ein Integral, das nicht von Temperatur und Zustandsdichte abhängt, kann als Faktor stehen bleiben.) (3 P.)

Lösung:

$$\begin{aligned} S &= k_\mathrm{B} \int \mathrm{d}\epsilon D s(\epsilon) \\ &= D k_\mathrm{B}^2 T \int \mathrm{d}x \left(\frac{1}{1+\mathrm{e}^x} \ln(1+\mathrm{e}^x) + \frac{1}{1+\mathrm{e}^{-x}} \ln(1+\mathrm{e}^{-x}) \right) = D k_\mathrm{B}^2 T \frac{\pi^2}{3}. \end{aligned}$$

mit der Substitution $x = \beta(\epsilon - \mu)$. Hieraus erhält man die spezifische Wärme $c = T\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}T}$.

10) Elektronen auf dem Diamantgitter

Das Diamantgitter besteht aus zwei Untergittern $a(0,0,0)+\mathbf{R}_n$ und $a(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})+\mathbf{R}_n$. Dabei bilden die $\mathbf{R}_n$ ein flächenzentriertes Gitter. An jedem Gitterpunkt sind s- und p-Orbitale. Man bildet die hybridisierten Zustände

$$\frac{1}{2}(|s\rangle + v_x|p_x\rangle + v_y|p_y\rangle + v_z|p_z\rangle)$$

mit $v_i = \pm 1$ und $\prod_i v_i = +1$ auf dem ersten Untergitter und $\prod_i v_i = -1$ auf dem zweiten. Die Energie-Eigenwerte findet man im Tight-Binding-Bild durch Diagonalisieren der Matrix

$$\begin{pmatrix}
a & b & b & b & -tq_1q_2q_3 & 0 & 0 & 0 \\
b & a & b & b & 0 & -\frac{tq_1}{q_2q_3} & 0 & 0 \\
b & b & a & b & 0 & 0 & -\frac{tq_2}{q_1q_3} & 0 \\
b & b & b & a & 0 & 0 & 0 & -\frac{tq_3}{q_1q_2} \\
-\frac{t}{q_1q_2q_3} & 0 & 0 & 0 & a & b & b & b \\
0 & -\frac{tq_2q_3}{q_1} & 0 & 0 & b & a & b & b \\
0 & 0 & -\frac{tq_1q_3}{q_2} & 0 & b & b & a & b \\
0 & 0 & 0 & -\frac{tq_1q_2}{q_3} & b & b & b & a
\end{pmatrix}$$

a) Dabei steht die linke obere 4×4-Matrix für die Elektronen-Zustände des einen Untergitters, die rechte untere für die des anderen Untergitters. Wie hängt a und b mit den atomaren Energien ϵ_s und ϵ_p zusammen? (2 P.)

Lösung: Die Matrix

$$\begin{pmatrix}
a & b & b & b \\
b & a & b & b \\
b & b & a & b \\
b & b & b & a
\end{pmatrix}$$

hat den Eigenwert $\epsilon_s = a + 3b$ für den Vektor $\begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$ (s-Zustand) und die Eigenwerte $\epsilon_p = a - b$ für die drei Vektoren $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ mit $\psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \psi_4 = 0$ (p-Zustände).

b) Die rechte obere und die linke untere 4×4-Matrix beschreibt die kovalente Bindung zwischen den jeweiligen benachbarten Orbitalen. Diese bewirkt, dass sich die Zustände von einem Atom zum nächsten bewegen können. Dabei ist $q_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_i}$. Wie hängt die Phase ϕ_i von der Gitterkonstanten a und dem Wellenvektor $\mathbf{k}$ ab? (2 P.)

Hinweis auf nächstem Übungsblatt. Kann auch am 7.12.05 abgegeben werden.

c) Man zeige, dass es je zwei Zustände der Energie $-b+a+t$ und $-b+a-t$ gibt (flache Bänder). Welche Art Orbitale sind bei diesen Zuständen nur beteiligt? (2 P.)

Lösung: Die Anwendung der Matrix auf den Vektor $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ ... \\ \psi_8 \end{pmatrix}$ ergibt für die erste Komponente $a\psi_1 + b(\psi_2+\psi_3+\psi_4) - tq_1q_2q_3\psi_5$. Dies soll gleich $(a-b+\sigma t)\psi_1$ sein, wobei $\sigma = \pm 1$. Dies wird mit

$$\psi_1+\psi_2+\psi_3+\psi_4 = 0, \quad -q_1q_2q_3\psi_5 = \sigma\psi_1$$

gelöst. Aus den anderen Komponentengleichungen folgt

$$\psi_5+\psi_6+\psi_7+\psi_8 = 0, \qquad \begin{array}{r} -\frac{q_1}{q_2q_3}\psi_6 = \sigma\psi_2 \\ -\frac{q_2}{q_1q_3}\psi_7 = \sigma\psi_3 \\ -\frac{q_3}{q_1q_2}\psi_8 = \sigma\psi_4 \end{array}$$

Diese sechs linearen Gleichungen für acht Unbekannte werden durch eine zweidimensionale lineare Mannigfaltigkeit gelöst. Daher hat man zwei linear unabhängige Lösungen. Aus den Bedingungen $\psi_1+\psi_2+\psi_3+\psi_4 = 0$ und $\psi_5+\psi_6+\psi_7+\psi_8 = 0$ folgt, dass hierbei nur p-Zustände beteiligt sind.