Theoretische Festkörperphysik

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

5. Übungsblatt
Abgabe Mittwoch, 30.11.05 zu Beginn der Vorlesung

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

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

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

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.)

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.)

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.)

(Fragen zu den anderen Zuständen kommen auf dem nächsten Übungsblatt)