Technische Universität Berlin Institut für Theoretische Physik Prof. Dr. Eckehard Schöll, PhD. Dr. Frank Elsholz

Ausgabe: 23. Mai 2006

SS 2006

6. Übungsblatt Theoretische Festkörperphysik I

Aufgabe 13 Tight binding Näherung

(8 Punkte)

In kubischen Kristallen sind die einfachsten Kombinationen von Atomfunktionen die drei p-Zustände $\phi_1(\mathbf{r}) = x\phi(\mathbf{r})$, $\phi_2(\mathbf{r}) = y\phi(\mathbf{r})$, $\phi_3(\mathbf{r}) = z\phi(\mathbf{r})$, die alle die gleiche Energie E_p besitzen $(\phi(\mathbf{r}))$ ist eine kugelsymmetrische Funktion). Das Potential jedes einzelnen Atomrumpfes sei kugelsymmetrisch und laute V(r). Geben Sie entsprechend der Vorlesung die Determinante an, aus der Sie im tight-binding Modell die elektronischen Energieeigenwerte $E(\mathbf{k})$ in erster Näherung berechnen können. (Sie brauchen nicht weiter zu rechnen.)

Aufgabe 14 Fermienergie

(7 Punkte)

Betrachten Sie die Elektronenzustände in einem konstanten Potential V_0 als Modell für die Valenzelektronen eines Metalles. Die Wellenfunktionen seien bei zyklischen Randbedingungen auf einen Würfel mit Volumen V beschränkt. Verwenden Sie im Folgenden die Ein-Elektronen-Zustände:

$$\psi_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}) = \chi_s \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\right)$$

wobei $\chi_{1/2} = (1,0)^T$ und $\chi_{-1/2} = (0,1)^T$ die Spinfunktionen sind, und die Komponenten von \mathbf{k} ganzzahlige Vielfache von $\frac{2\pi}{V^{1/3}}$ sind.

- a) Wieviele Zustände können besetzt werden, wenn die Fermienergie E_F als maximale Energie eines Elektrons vorgegeben ist? Dabei soll die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt und der Kontinuumslimes durchgeführt werden.
- b) Leiten Sie den entsprechenden Ausdruck für das zweidimensionale Elektronengas her.

Abgabe: 2. Juni 2006

WWW-Seite: http://wwwitp.physik.tu-berlin.de/lehre/TFP/

Scheinkriterien: Einmal Vorrechnen in den Übungen und eine erfolgreiche Rücksprache. *und* 60 % der erreichbaren Punkte in den Übungsaufgaben (Abgabe in Dreiergruppen!)

Sprechstunden: Schöll: Mi 14:30 - 15:30 Uhr PN 735, Elsholz: Di. 14 - 15 Uhr PN 629