Prof. Dr. Bernd Pilawa, Dr. Jan Nicolas Voss - voss@kit.edu

Übungsblatt 7

Aufgabe 1: Das hexagonale Gitter

Die primitiven Vektoren des hexagonalen Bravais-Gitters sind wie folgt gegeben:

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{x} + \frac{a}{2}\vec{y}, \quad \vec{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{x} + \frac{a}{2}\vec{y}, \quad \vec{a}_3 = c\vec{z}. \tag{1}$$

a) Zeigen Sie, dass das Volumen der primitiven Einheitszelle, das durch die oberen Vektoren aufgespannt wird, gleich $\frac{\sqrt{3}a^2c}{2}$ ist.

b) Zeigen Sie, dass die primitiven Vektoren des dazu reziproken Gitters die folgenden sind:
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\vec{x} + \frac{2\pi}{a}\vec{y}, \quad \vec{b}_2 = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\vec{x} + \frac{2\pi}{a}\vec{y}, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\vec{z}. \tag{2}$$

c) Beschreiben und skizzieren Sie die erste Brillouin-Zone des reziproken Gitters.

Aufgabe 2: Sommerfeld-Theorie der Metalle

Bei der Sommerfeld-Theorie der Metalle wird angenommen, dass die schwach gebundenen Valenzelektronen der Metallatome nicht an ein bestimmtes Atom gebunden sind, sondern sich frei durch den gesamten Festkörper bewegen können. Die Valenzelektronen können daher näherungsweise als freie Elektronen in einem 3-dimensionalen, unendlich tiefen Potentialtopf der Seitenlänge a beschrieben werden. Die Energie E der Zustände ist daher mit den positiven ganzzahligen Quantenzahlen n_1, n_2 und n_3 gegeben.

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (n_1 + n_2 + n_3) = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2_{n_1,n_2,n_3}. \tag{3}$$

a) Da a für einen makroskopischen Festkörper sehr groß ist, kann ein Kontinuum von Energiezuständen angenommen werden. Zeigen Sie, wie die Anzahl der besetzten Energiezustände N mit Hilfe des Volumens der Fermi-Kugel mit der maximalen Fermi-Wellenzahl k_F als Radius ausgedrückt werden kann.

b) Zeigen Sie, dass für die Fermi-Energie bei $T = 0\,\mathrm{K}$ folgende Formel gilt:
$$E_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3N}{\pi V}\right)^{\frac{2}{3}}. \tag{4}$$

c) Das Metall Kalium hat eine Dichte von $\rho = 0.86\,\mathrm{g\,m^{-3}}$ und eine Atommasse von $m = 39\,\mathrm{u}$. Berechnen Sie die Fermi-Energie unter der Annahme, dass jedes Kaliumatom ein Elektron an das freie Elektronengas abgibt.

d) Zeigen Sie, dass die Zustandsdichte für das freie Elektronengas durch die folgende Formel gegeben ist:

$$D(E) = \frac{1}{V}\frac{dN}{dE} = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^2}\sqrt{E}. \tag{5}$$

Aufgabe 3: Wärmekapazität des Elektronengases im Festkörper

Die Wärmekapazität des Elektronengases in einem metallischen Festkörper ergibt sich in der Sommerfeld-Theorie zu:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{\pi^2}{2}\frac{Nk_B^2}{E_F}T. \tag{6}$$

Klassisch ist die Wärmekapazität für N Teilchen in einem idealen Gas gegeben durch $C_V = \frac{3}{2}Nk_B$. Schätzen Sie den Anteil der Elektronen, die zur Wärmekapazität bei $T = 300\,\mathrm{K}$ beitragen.