

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik
Blatt 11

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040)
Sebastian Putz (4.1.36, phone 2032)

(theory, Tue 12h-14h c.t., Phy 7.3.14)
(experiment, Thu 10h-12h c.t., Phy 7.3.14)

Part I: Theory

11.1 Density of states for tight-binding models

Consider the following tight-binding Hamiltonian representing the valence electrons of an infinite chain of atoms with the lattice constant a :

$$\hat{H} = \lim_{N_{\text{sites}} \rightarrow \infty} \left\{ -t \sum_{i=1}^{N_{\text{sites}}} (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|) \right\},$$

where for simplicity the spin is neglected and we assume periodic boundary conditions.

1. Diagonalize analytically the Hamiltonian by taking advantage of the translational invariance of the system. (1 point)
2. Prove that the density of states for the system reads (in the limit $N_{\text{sites}} \rightarrow \infty$)

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{4t^2 - E^2}}$$

for $|E| < 2t$ and vanishes elsewhere. Hint: start from the definition of the density of states,

$$\rho(E) = \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}),$$

where N_{tot} is the total number of states for the system and α is labelling the eigenstates of the system with eigenvalue E_{α} . The following relation involving the Dirac delta can be useful:

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i),$$

where the points x_i are the zeroes of $f(x)$. (2 points)

3. What is the density of states for a 1-dimensional free electron gas? What does it have in common with the result calculated in 11.1.2? (2 points)
4. Now consider the generalization of the tight-binding model of an infinite chain to a square (2D) and a cubic (3D) lattice. What are the dispersion relations in these two cases? (1 point)

5. Prove that the density of states can be reduced to the generic form

$$\rho_d(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\lambda \cos(\lambda E) J_0^d(2t\lambda),$$

where $J_0(x)$ is a Bessel function defined as

$$J_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dy \exp(-ix \cos y)$$

and d is the dimensionality, $d = 1, 2, 3$. Hint: the following relations may be useful

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dy e^{-ixy},$$

$$J_0(-x) = J_0^*(x) = J_0(x).$$

(2 points)

6. Prove that the density of states for the 1-dimensional tight-binding model obtained in 11.1.5 coincides with that obtained in 11.1.2. (1 point)

11.2 Wick's theorem (in class)

1. Show that, for a system of non-interacting fermions described by the Hamiltonian in the energy basis

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha} \left(= \sum_{i=1}^N \hat{h}_i \right)$$

the following relation for the many-body grandcanonical expectation value holds:

$$\langle \hat{c}_{\alpha_1}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_2}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_3} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle = \langle \hat{c}_{\alpha_1}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle \langle \hat{c}_{\alpha_2}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_3} \rangle \delta_{\alpha_1 \alpha_4} \delta_{\alpha_2 \alpha_3} - \langle \hat{c}_{\alpha_1}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_3} \rangle \langle \hat{c}_{\alpha_2}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle \delta_{\alpha_1 \alpha_3} \delta_{\alpha_2 \alpha_4},$$

where

$$\langle \hat{c}_{\alpha_1}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_2}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_3} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \hat{c}_{\alpha_1}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_2}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha_3} \hat{c}_{\alpha_4} \exp[-\beta(H - \mu N)] \right\}$$

and Z is the grandcanonical partition function. The trace is taken over the full Fock space. Hint: Consider the use of the eigenbasis of \hat{h} .

2. Derive from 11.2.1 that, for noninteracting fermions, in every other given single particle basis $\{|n\rangle\}$ the following relation holds:

$$\langle \hat{c}_{n_1}^{\dagger} \hat{c}_{n_2}^{\dagger} \hat{c}_{n_3} \hat{c}_{n_4} \rangle = \langle \hat{c}_{n_1}^{\dagger} \hat{c}_{n_4} \rangle \langle \hat{c}_{n_2}^{\dagger} \hat{c}_{n_3} \rangle - \langle \hat{c}_{n_1}^{\dagger} \hat{c}_{n_3} \rangle \langle \hat{c}_{n_2}^{\dagger} \hat{c}_{n_4} \rangle.$$

Note that this is valid even if in this basis the Hamiltonian

$$\hat{H} = \sum_{n,m} h_{nm} \hat{c}_n^{\dagger} \hat{c}_m$$

would contain non-diagonal terms, h_{nm} for $n \neq m$. Hint: Diagonalize H first, using a unitary transformation $\hat{c}_n = \sum_{\alpha} u_{n\alpha} \hat{c}_{\alpha}$. Apply the equation proven in 11.2.1. Finally perform the canonical transformation in the reverse direction.

Part II: Experiment

11.3 Inelastische Neutronenstreuung

Ein Strahl von Neutronen der Energie $E = 0.0540$ eV falle unter $\alpha = 90$, $\beta = 90$, $\gamma = 0$ auf einen Bleikristall, wobei α , β , γ die Winkel mit der x-Achse, der y-Achse bzw. der z-Achse beschreiben. Die Bragg-Reflexion erfolgt unter der Richtung $\alpha' = 0$, $\beta' = 90$, $\gamma' = 90$. Zur Ermittlung eines Punktes der Phononendispersionsrelation wird der unter $\alpha'' = 1.47$, $\beta'' = 88.53$, $\gamma'' = 90$ gestreute Neutronenstrahl untersucht, für den die Energie $E'' = 0.0535$ eV gemessen wird. Berechnen Sie den Wellenzahlvektor \vec{K} , seinen Betrag und die Kreisfrequenz Ω der Phononen, die die zusätzliche Streuung hervorrufen. Blei hat ein fcc-Gitter mit der Gitterkonstanten $a = 0.494$ nm, der Kristall sei mit seinen Hauptachsen entlang des kartesischen Koordinatensystems ausgerichtet.

Hinweis: Die Impulserhaltung lautet in diesem Fall $\Delta\vec{k} = \pm\vec{K} + \vec{G}$, wobei $\Delta\vec{k}$ die Änderung des Wellenvektors der Neutronen ist, \vec{K} der Wellenvektor des beteiligten Phonons und \vec{G} ein reziproker Gittervektor. Konstruieren Sie sich die Basisvektoren des reziproken Gitters und finden Sie zunächst die reflektierende Netzebene bzw. \vec{G} , die für die elastische Neutronenbeugung verantwortlich ist. Sie können dann mit Hilfe der Impulserhaltung den Wellenvektor des Phonons berechnen.

(3 Punkte)

11.4 Freie Elektronen in einfachen Metallen

1. Berechnen Sie die Dichte freier Elektronen $n = N/V$, die Fermienergie ϵ_F (in eV) und die Fermitemperatur T_F für Natrium (bcc-Struktur, $a = 4.28$ Å), Kalium (bcc-Struktur, $a = 5.33$ Å) und Aluminium (fcc-Struktur, $a = 4.04$ Å).

(2 Punkte)

2. Berechnen Sie die kinetische Energie eines freien Elektrons in einem dreidimensionalen, einfach-kubischen (sc) Gitter mit Gitterkonstante a , wenn der Wellenvektor

- im Mittelpunkt einer Seitenfläche der ersten Brillouinzone (1.BZ), d.h. $\vec{k}_1 = \frac{1}{2}\vec{G}_{100}$,
- in der Mitte einer Kante der 1.BZ, d.h. $\vec{k}_2 = \frac{1}{2}\vec{G}_{110}$,
- in einer Ecke der 1.BZ, d.h. $\vec{k}_3 = \frac{1}{2}\vec{G}_{111}$, liegt.

Berechnen Sie k_F für ein zweiwertiges Metall und geben Sie an, welche der Zustände \vec{k}_1 , \vec{k}_2 , \vec{k}_3 besetzt sind.

(2 Punkte)

11.5 Drei-, zwei- und eindimensionales Elektronengas

1. Leiten Sie für $T = 0$ die Beziehungen für die Fermienergie ϵ_F (als Funktion der Elektronenzahl N), für die kinetische Energie E (als Funktion von N und ϵ_F) und für die Zustandsdichte $D(\epsilon) = \frac{dN}{d\epsilon}$ her

- für ein dreidimensionales,
- für ein zweidimensionales,
- für ein eindimensionales Elektronengas.

(2 Punkte)

2. Wie hängt für $k_B T \ll \epsilon_F$ für die drei verschiedenen Fälle das chemische Potential μ näherungsweise von der Temperatur T ab? Hinweis: der letzte Aufgabenteil ist schwieriger. Verwenden Sie die Entwicklung des Integrals

$$\int_0^\infty g(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon = \int_0^\mu g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{d}{d\epsilon} g(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 \frac{d^3}{d\epsilon^3} g(\mu) + \dots$$

mit der Fermi-Dirac Verteilungsfunktion $f(\epsilon, T)$. überlegen Sie sich für die Übung, wie man auf diese Entwicklung kommen kann. (3 Punkte)