Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik
Blatt 12

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040) (theory, Tue 12h-14h c.t., Phy 7.3.14)
Sebastian Putz (4.1.36, phone 2032) (experiment, Thu 10h-12h c.t., Phy 7.3.14)

Part I: Theory

12.1 Occupation number representation

Let us consider a fermionic system with two single particle states $|\alpha\rangle$ and $|\beta\rangle$ that span the (two-dimensional) *one*-particle Hilbert space.

1. Which dimension has the *two*-particle Hilbert space? Which dimension has the entire Fock space? Write down the basis of the Fock space explicitly as Slater determinants of the wave functions $\phi_\alpha(\mathbf{r})$, $\phi_\beta(\mathbf{r})$ and in the occupation number representation. (2 Points)

2. Calculate, in the Fock basis, the matrix representation of the creation and annihilation operators c_μ, $c_\mu^\dagger$ ($\mu = \alpha, \beta$) and also of the occupation operators $n_\mu = c_\mu^\dagger c_\mu$ (2 Points)

3. Verify the anticommutator relations
$$[c_\mu, c_\nu]_+ = [c_\mu^\dagger, c_\nu^\dagger]_+ = 0\,, \quad [c_\mu, c_\nu^\dagger]_+ = \delta_{\mu\nu}$$
explicitly using matrix multiplication of the matrices calculated at point 2. (2 Points)

4. Consider a Hamilton operator
$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}\,,$$
where $\hat{T}$ is a one body operator and $\hat{V}$ a two body one. Remember that in second quantization one and two body operators are respectively written as:
$$\hat{T} = \sum_{\lambda,\mu} c_\lambda^\dagger \langle\lambda|\,\hat{t}\,|\mu\rangle c_\mu\,, \quad \hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mu\lambda'\mu'} c_\lambda^\dagger c_\mu^\dagger \langle\lambda,\mu|\,\hat{v}\,|\lambda',\mu'\rangle c_{\mu'} c_{\lambda'}\,,$$
where $\{|\lambda\rangle\}$ represents a generic single particle basis and $c_\lambda^\dagger$ the corresponding creation operator and, for the (first quantization) matrix element in the two body operator we adopt the convention:
$$\langle\lambda,\mu|\,\hat{v}\,|\lambda',\mu'\rangle \equiv \int \mathrm{d}\mathbf{r}_1 \mathrm{d}\mathbf{r}_2 \phi_\lambda^*(\mathbf{r}_1)\phi_\mu^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\phi_{\lambda'}(\mathbf{r}_1)\phi_{\mu'}(\mathbf{r}_2)\,.$$
With respect to the single particle basis $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ the (first quantization) matrix elements read:
$$\langle\alpha|\,\hat{t}\,|\alpha\rangle = \langle\beta|\,\hat{t}\,|\beta\rangle = \epsilon\,, \quad \langle\alpha|\,\hat{t}\,|\beta\rangle = \langle\beta|\,\hat{t}\,|\alpha\rangle = t$$
$$\langle\alpha,\beta|\,\hat{v}\,|\alpha,\beta\rangle = U\,, \quad \langle\alpha,\beta|\,\hat{v}\,|\beta,\alpha\rangle = J.$$
The other two body matrix elements follows using the definition given above.
Write the operator $\hat{H}$ in second quantization and in the matrix representation (starting from the single particle basis introduced). Calculate the eigenvalues and eigenvectors for $\hat{H}$. (2 Points)

5. (Optional) Again, write $\hat{H}$ in second quantization, but this time as a single particle basis use the eigenvectors of $\hat{t}$. Which is the connection between this creation and annihilation operators and the ones considered in the points 1.-4.? Is this a unitary transformation?

Part II: Experiment

12.2 Interbandabsorption der Alkalimetalle

In den Alkalimetallen (bcc-Struktur) beobachtet man experimentell Absorption von Licht für Photonenenergien, die größer als ca. 0.64 E_F sind, wobei E_F die Fermienergie ist. Dieses Verhalten kann man schon mit dem Modell des "leeren Gitters" quantitativ verstehen. Dazu stellt man lediglich die Dispersionsrelation des *freien* Elekrons durch Anwendung der Gitterperiodizität innerhalb der ersten Brillouinzone dar:

$$E_{hkl}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}(\vec{k} + \vec{G}_{hkl})^2,$$

mit $\vec{k}$ innerhalb der 1. BZ und reziproken Gittervektoren $\vec{G}_{hkl}$.

1. Die bcc-Struktur hat ein reziprokes Gitter mit fcc-Struktur und einer konventionellen kubischen Zelle der Kantenlänge $4\pi/a$. Berechnen Sie die sechs energetisch niedrigsten Energiebänder in der ersten Brillouinzone für die ΓH- und ΓN-Richtungen, der H-Punkt ist hierbei $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(1,0,0)$ und der N-Punkt $\vec{k} = \frac{\pi}{a}(1,1,0)$, beide liegen auf dem Rand der Brillouinzone. Dazu betrachten Sie einfach die Energien E_{hkl} unter der Wahl verschiedener (hkl) und sortieren diese in aufsteigender Reihenfolge, z.B. als Vielfaches der Energie $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}(\frac{2\pi}{a})^2$. (3 Punkte)

2. Zeichnen Sie $E(k)$ in der ersten Brillouinzone für die beiden jeweils energetisch niedrigsten Bänder in beiden Richtungen. (1 Punkt)

3. Berechnen Sie den Fermiwellenvektor $\vec{k}_\mathrm{F}$ in Abhängigkeit von der Gitterkonstante a und zeichnen Sie die Fermienergie in die Zeichnung ein. (1 Punkt)

4. Bestimmen Sie mit den bisherigen Ergebnissen die kleinstmögliche Energie ΔE für einen vertikalen Interbandübergang in Einheiten der Fermienergie E_F und tragen Sie den Interbandübergang in die Zeichnung ein.
hfill(1 Punkt)

5. Wie groß ist jeweils die Grenzwellenlänge (größte Wellenlänge) der Absorption für Natrium, Kalium, Rubidium? (1 Punkt)

12.3 Leitfähigkeitstensor

Für einen homogenen Leiter ist die Leitfähigkeit $\sigma_0 = en\mu$ ein Skalar. Legt man ein Magnetfeld an, so wird die Leitfähigkeit richtungsabhängig, d.h. ein Tensor. Zeigen Sie, dass im Drude-Modell des als klassischen Teilchens behandelten Elektrons im Fall eines in z-Richtung orientierten Magnetfelds $\vec{B}$ die Stromdichte durch

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1+(\omega_c\tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+(\omega_c\tau)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

gegeben ist, wobei $\omega_c = eB/m_\mathrm{e}$ die Zyklotronfrequenz sei und τ die mittlere Stoßzeit.

(3 Punkte)