Fakultät für Physik
Prof. Christian Back, Prof. Milena Grifoni

WS 12/13

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik

Blatt 13

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

13.1 The Stoner model of magnetism

The Stoner model is applied to those materials for which the magnetism is generated by the itinerant conduction electrons. They are typically transition metals in which the conduction band formed by the d or f orbitals is narrow in energy. The associated high density of states at the Fermi energy implies a strong screening of the electron-electron interaction. It is thus reasonable to describe these systems by a free electron Hamiltonian with contact interaction. Consider the effective Hamiltonian for a system of interacting electrons written in first quantization:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \Delta_i + \sum_{i\neq j}\frac{U}{2}\,\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

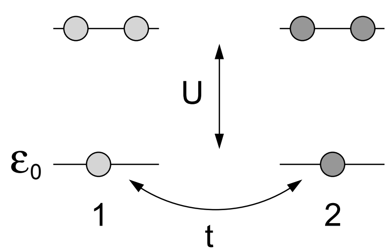
and write it in the second quantization. As single particle basis use the position basis. Hint: remember that due to the Pauli principle you cannot create 2 fermions with the same quantum numbers.

(2 points)

13.2 Double site Hubbard model

The extended Hubbard Hamiltonian for a two site system reads explicitly:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \epsilon_0\left(\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}\right) + t\left(\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}\right) \\ &+ U\left(\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}\right).\end{aligned}$$



1. Calculate the two particle eigenenergies analytically. Treat the case of parallel and antiparallel spin separately. Plot the results as a function of U/t. Hint: For the antiparallel case consider the basis of the corresponding Hilbert space:

$$\hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}|0,0\rangle, \quad \hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}|0,0\rangle, \quad \hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2\downarrow}|0,0\rangle, \quad \hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}^\dagger_{1\downarrow}|0,0\rangle.$$

Calculate the matrix elements of $\hat{H}$ in this basis and diagonalize the resulting 4×4 matrix. (3 points)

2. Repeat the diagonalization procedure as in 1., but this time start with the matrix representation of the Hamiltonian in the basis that diagonalizes the parity operator $\hat{P}$, where the latter is defined by the relations:

$$\hat{P}|0,0\rangle = |0,0\rangle, \quad \hat{P}\hat{c}_{1\sigma}\hat{P}^\dagger = \hat{c}_{2\sigma}, \quad \hat{P}\hat{P}^\dagger = \hat{P}^\dagger\hat{P} = \hat{1}.$$

Hint: Construct the parity eigenvectors as linear combinations of the occupation number representation states introduced in 1. (2 points)

3. Calculate the ground state in the Hartree-Fock approximation and compare it with the exact result from 1. Hint: Make the following assumptions suggested by the exact diagonalization: $\langle \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}\hat{c}_{i\uparrow}\rangle = 0, i = 1,2$ and $\langle \hat{c}^\dagger_{1\uparrow}\hat{c}_{1\uparrow}\rangle = \langle \hat{c}^\dagger_{1\downarrow}\hat{c}_{1\downarrow}\rangle = \langle \hat{c}^\dagger_{2\downarrow}\hat{c}_{2\downarrow}\rangle = \langle \hat{c}^\dagger_{2\uparrow}\hat{c}_{2\uparrow}\rangle$. (3 points)

Part II: Experiment

13.3 Ladungsträgerkonzentration bei Störstellenleitung

Betrachten Sie einen isotropen Halbleiter mit einer Konzentration N_D von Donatoren der Ionisationsenergie I_D bei Temperaturen $T \ll \frac{I_\mathrm{D}}{k_\mathrm{B}}$.

1. Zeigen Sie, dass die Elektronenkonzentration im Leitungsband durch die Beziehung

$$n = n_0 \exp\left(\frac{\mu - E_\mathrm{gap}}{k_\mathrm{B}T}\right)$$

mit dem chemischen Potential μ und der effektiven Masse m^* gegeben ist, wobei

$$n_0 = 2\left(\frac{m^* k_\mathrm{B}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}.$$

Das chemische Potential soll im Vergleich zur thermischen Energie $k_\mathrm{B}T$ weit unterhalb der Leitungsbandkante liegen. (2 Punkte)

2. Zeigen Sie, dass für tiefe Temperaturen ($n_0 \ll N_\mathrm{D}$) für die Elektronenkonzentration

$$n \approx (n_0 N_\mathrm{D})^{1/2} \exp\left(-\frac{I_\mathrm{D}}{2k_\mathrm{B}T}\right)$$

gilt. Hinweis: Gehen Sie hierzu von der Neutralitätsbedingung $N_\mathrm{D}^+ = n$ aus und rechnen Sie die Konzentration der ionisierten Donatoren N_D^+ mit Hilfe der Fermi-Dirac-Verteilung aus. Lösen Sie nach geeigneter Substitution die resultierende quadratische Gleichung unter Beachtung der Näherung $n_0 \ll N_\mathrm{D}$. (2 Punkte)

13.4 Diskussionsfragen für die Übung

Bereiten Sie sich darauf vor, folgende Fragen zusammen mit Ihren Kommilitonen zu erörtern:

1. Woran entscheidet sich genau, ob ein kristalliner Festkörper ein Metall ist, ein Halbleiter oder ein Isolator? Wie hängt das mit der Kristallstruktur zusammen? Welche Rolle spielt die Fermifläche dabei?

2. Begründen Sie die Einführung des Quasiteilchens "Loch". Macht es auch Sinn, in Metallen von Lochzuständen zu sprechen?

13.5 Literaturarbeit

Als weiterführendes Thema zur Vorlesung bereiten Sie sich bitte darauf vor, über Quantenoszillationen der Fermielektronen in einem Magnetfeld und den sogenannten de Haas-van Alphen Effekt zu diskutieren. Schlagen sie hierzu in einschlägigen Lehrbüchern nach, z.B. Ibach/Lüth: Festkörperphysik, 7. Auflage, Seite 282ff. oder Ashcroft/Mermin: Festkörperphysik, 3. Auflage., Seite 345ff. Beantworten Sie sich dabei insbesondere folgende Fragestellungen:

1. Welcher Quantisierung unterliegen Elektronen im Festkörper bei nichtverschwindendem Magnetfeld? Was versteht man unter den sogenannten Landau-Röhren?
2. Wie ist der Zusammenhang von Fermiflächen und Landauröhren und warum ist die mittlere Energie der Elektronen dann periodisch abhängig vom Magnetfeld?
3. Was kann man mit Hilfe dieses Effekts über die Topologie von Fermiflächen lernen?
4. In welche Richtung ändert sich die Energie bezogen auf den Fall ohne Magnetfeld? Was bedeutet diese Energieänderung z.B. für die magnetische Suszeptibilität des Elektronensystems? Handelt es sich um Diamagnetismus oder Paramagnetismus?
5. Welchen Hamiltonoperator müsste man verwenden, um das Problem z.B. für freie Elektronen exakt zu lösen?