

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik
 Blatt 9

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040)
 Dr. Christoph Lange (2.0.07, phone 5704)

(Theorie, Thu 8:30h - 12h, Phy 2.1.29)
 (Experiment, Fr 12:30h - 14:00h, Phy 2.1.29)

Part I: Theory

9.1 A system of interacting fermions

Consider a Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

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_{λ}^{\dagger} the corresponding creation operator and, for the (first quantization) matrix element in the two body operator we adopt the convention:

$$\langle \lambda, \mu | \hat{v} | \lambda', \mu' \rangle \equiv \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_{\lambda}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{\mu}^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_{\mu'}(\mathbf{r}_2) \phi_{\lambda'}(\mathbf{r}_1).$$

With respect to the single particle basis $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ the (first quantization) matrix elements read:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{t} | \alpha \rangle = \langle \beta | \hat{t} | \beta \rangle = \epsilon, \quad \langle \alpha | \hat{t} | \beta \rangle = \langle \beta | \hat{t} | \alpha \rangle = t \\ \langle \alpha, \beta | \hat{v} | \alpha, \beta \rangle = U, \quad \langle \alpha, \beta | \hat{v} | \beta, \alpha \rangle = J. \end{aligned}$$

The other two body matrix elements follows using the definition given above.

- a) Write the operator \hat{H} in second quantization and in the matrix representation. Calculate the eigenvalues and eigenvectors for \hat{H} . **(2 Points)**
- b) 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 part a)? Is this a unitary transformation? **(2 Points)**

9.2 Coulomb interaction in the two electron problem

Consider a diatomic molecule composed by two identical atoms. For simplicity restrict yourself to consider only one orbital per atom: i.e. assume that the electronic field operator can be written as:

$$\psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) = \phi_1^*(\vec{r}) c_{1\sigma}^{\dagger} + \phi_2^*(\vec{r}) c_{2\sigma}^{\dagger}$$

where $\phi_i(\vec{r}) = \phi_{\text{at}}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ is the atomic wave function centered around the equilibrium position of the atom i .

- a) Prove that the Coulomb interaction for the system in second quantization can be written in the following as the sum of two contribution $H_{\text{Coulomb}} = H_{\text{Coulomb}}^{(1)} + H_{\text{Coulomb}}^{(2)}$ with:

$$\begin{aligned}
H_{\text{Coulomb}}^{(1)} &= C_{12}(\hat{n}_{1\uparrow} + \hat{n}_{1\downarrow})(\hat{n}_{2\uparrow} + \hat{n}_{2\downarrow}) \\
&\quad - 2J_{12} \left(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \frac{1}{4}(\hat{n}_{1\uparrow} + \hat{n}_{1\downarrow})(\hat{n}_{2\uparrow} + \hat{n}_{2\downarrow}) \right) \\
H_{\text{Coulomb}}^{(2)} &= U(\hat{n}_{1\uparrow}\hat{n}_{1\downarrow} + \hat{n}_{2\uparrow}\hat{n}_{2\downarrow}) \\
&\quad + X_{12} \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger}c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger}c_{1\sigma})(\hat{n}_{1,-\sigma} + \hat{n}_{2,-\sigma}) \\
&\quad + J_{12}(c_{1\uparrow}^{\dagger}c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{2\downarrow}c_{2\uparrow} + c_{2\uparrow}^{\dagger}c_{2\downarrow}^{\dagger}c_{1\downarrow}c_{1\uparrow})
\end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned}
U &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}d\vec{s} |\phi_{\text{at}}(\vec{r})|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} |\phi_{\text{at}}(\vec{s})|^2 \\
C_{12} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}d\vec{s} |\phi_1(\vec{r})|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} |\phi_2(\vec{s})|^2 \\
J_{12} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}d\vec{s} \phi_1^*(\vec{r})\phi_2^*(\vec{s}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} \phi_1(\vec{s})\phi_2(\vec{r}) \\
X_{12} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}d\vec{s} \phi_1^*(\vec{r})\phi_2(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{s}|} |\phi_1(\vec{s})|^2.
\end{aligned}$$

Moreover we have introduced the operator $\hat{\mathbf{S}}_i$ as the spin operator on the atom i , i.e:

$$\hat{S}_{i,\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\tau\tau'} c_{i\tau}^{\dagger} \sigma_{\tau\tau'}^{(\alpha)} c_{i\tau'}$$

with $\sigma^{(\alpha)}$ the three Pauli matrices ($\alpha = x, y, z$).

(4 Points)

- b) Consider now the two electron Hilbert space of the system. Which is its dimension? Write explicitly the elements of the basis in the occupation number representation. **(1 Point)**
- c) Prove that $H_{\text{Coulomb}}^{(1)}$ only acts on the two electron states with one electron per atom (the neutral sector), and viceversa that $H_{\text{Coulomb}}^{(2)}$ is not vanishing only if one also includes configurations with two electrons on the same atoms (ionized sector). **(2 Points)**
- d) Prove that the exchange constant J_{12} introduced above is always non-negative. Hint: Remember that the Fourier transform of a convolution is the product of the Fourier transform of the convolved functions. Which is the physical consequence for the energy of the neutral two particle configuration? **(3 Points)**
- e) **(In class)** Assume that the single particle Hamiltonian is given by $H^{(0)} = b \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger}c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger}c_{1\sigma})$. Diagonalize the Hamiltonian $H = H^{(0)} + H_{\text{Coulomb}}^{(1)}$ on the neutral sector of the two particle Fock space. Discuss the spin configuration of its ground state as a function of J_{12} and b .

Part II: Experiment

9.3 Fermi-Flächen und Brillouin-Zonen

Wir betrachten ein zweidimensionales rechteckiges Gitter mit Gitterkonstanten a und b , auf dem gleichartige Atome mit jeweils 5 Valenzelektronen angeordnet sind.

- (a) Konstruieren Sie die ersten 3 Brillouin-Zonen. (1 Punkt)
- (b) Wie sieht die Fermi-Fläche aus, wenn wir von völlig freien Elektronen ausgehen? Wie ändert sich die Form der Fermi-Fläche qualitativ, wenn ein schwach periodisches Potenzial wirksam ist? (1 Punkt)

9.4 Reduziertes Zonenschema

Betrachten Sie die Energiebänder von freien Elektronen in einem fcc-Kristall in der Näherung des leeren Gitters im reduzierten Zonenschema. Skizzieren Sie in der [111]-Richtung die Energien aller Bänder bis zum Sechsfachen der niedrigsten Bandenergie an der Zonengrenze bei

$$k = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right).$$

Verwenden Sie die niedrigste Bandenergie als Energieeinheit. Diese Aufgabe zeigt, warum Bandkanten nicht unbedingt in der Zonenmitte liegen müssen. Diskutieren Sie qualitativ, was passiert, wenn ein endliches Kristallpotenzial berücksichtigt wird. (3 Punkte)

Hinweis: Verwenden Sie eine geeignete Parametrisierung der Energie entlang der vorgegebenen Kristallrichtung mit einem Parameter $x \in [0, 0.5]$ und wählen Sie reziproke Gittervektoren G , die zu den geforderten Bändern führen.

9.5 Zweidimensionales System stark gebundener Elektronen

Wir betrachten ein einfach quadratisches Gitter mit Gitterkonstante a und einer Tight-binding-Bandstruktur der Elektronen, parametrisiert mit einer Energie t gemäß

$$E(k) = -t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) - 2].$$

- (a) Skizzieren Sie das reziproke Gitter und die erste Brillouin-Zone und bestimmen Sie die Lage des Bandminimums und -maximums, sowie die Bandbreite in Einheiten von t . (1 Punkt)
- (b) Zeichnen Sie qualitativ den Verlauf des Bandes längs der charakteristischen Liniensegmente $(0, 0) - (\pi/a, 0) - (\pi/a, \pi/a) - (0, 0)$. Geben Sie bei der Beschriftung der y -Achse die Energie in Einheiten von t an. (1 Punkt)
- (c) Geben Sie den funktionalen Zusammenhang für die Gruppengeschwindigkeit der Elektronen $v(k)$ und die Beträge $|v(k)|$ für die [10] und die [11]-Richtung an. Wo ist die Geschwindigkeit maximal? (1 Punkt)
- (d) Zeichnen Sie in der Brillouin-Zone die Verbindungslinie von $(\pi/a, 0)$ nach $(0, \pi/a)$ und berechnen Sie die Energie längs dieser Linie. (1 Punkt)
- (e) Das Band liege oberhalb des letzten vollständig gefüllten Bandes und habe keinen Überlapp mit anderen Bändern. Wie groß ist die Bandfüllung für $E_F = 2t$? Begründen Sie Ihre Antwort. (1 Punkt)
- (f) Berechnen Sie für eine Füllung von 0.1 Elektronen pro Elementarzelle den Fermi-Impuls, die Fermi-Energie, sowie deren Zahlenwerte für $t = 1 \text{ eV}$ und $a = 4 \text{ \AA}$. Hinweis: Verwenden Sie die quadratische Näherung für die Kosinus-Funktionen am Bandminimum. (1 Punkt)