Fakultät für Physik
Prof. Rupert Huber, Prof. Milena Grifoni

WS 15/16

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik

Blatt 12

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040) (Theorie, Thu 8:30h - 12h, Phy 2.1.29)
Dr. Christoph Lange (2.0.07, phone 5704) (Experiment, Fr 12:30h - 14:00h, Phy 2.1.29)

Part I: Theory (... as it could be in the exam)

12.1 Short questions

Give a concise and as much as possible precise answer to the following questions:

a) Which is the fundamental postulate of statistical mechanics? Comment on its consequences.

b) Explain in which sense the mixing of identical gases can be considered a reversible process. What about the mixing of different gases?

c) Explain why the Heisenberg Hamiltonian is an effective Hamiltonian for the description of ferromagnetism in a spin crystal.

(3 Points)

12.2 Partition functions for 3 particles

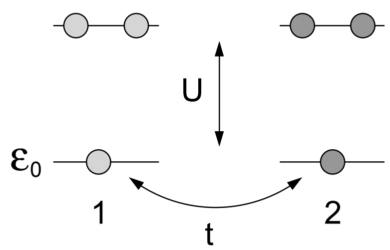
Consider three particles distributed on two energy levels (with energies ϵ_0 and ϵ_1). Calculate the canonical partition function for the system in the case of: i) Classical, distinguishable particles, ii) Bosons with spin 0, iii) Fermions with spin 1/2.

(3 Points)

12.3 Double site Hubbard model

The Hubbard Hamiltonian for a two site system reads:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[\epsilon_0 \left(\hat{c}^\dagger_{1\sigma}\hat{c}_{1\sigma} + \hat{c}^\dagger_{2\sigma}\hat{c}_{2\sigma} \right) + t \left(\hat{c}^\dagger_{1\sigma}\hat{c}_{2\sigma} + \hat{c}^\dagger_{2\sigma}\hat{c}_{1\sigma} \right) \right] + U \sum_{i=1,2} \hat{c}^\dagger_{i\uparrow}\hat{c}_{i\uparrow}\hat{c}^\dagger_{i\downarrow}\hat{c}_{i\downarrow}.$$



a) Calculate the two particle eigenenergies analytically. Treat the case of parallel and antiparallel spin separately. Which is the ground state of the system?. 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)

b) Repeat the diagonalization procedure as in a), 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:

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

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

c) Calculate the ground state in the Hartree-Fock approximation and compare it with the exact result from a). In order to reduce the mean field parameters to a minimum, make the following assumptions: $\langle \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}\hat{c}_{i\uparrow}\rangle = 0, i = 1, 2$ 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

12.4 Wasserstoffatom-Modell für Dotieratome im Halbleiter

Dotieratome, die das Elektron oder Loch nicht stark binden, lassen sich im Modell des Wasserstoffatoms beschreiben. Dazu wird das umgebende Halbleitermaterial als Dielektrikum mit der entsprechenden Dielektrizitätskonstante ϵ berücksichtigt und das in der Energie nächstliegende Band mit seiner effektiven Masse m^* als Vakuum genähert.

(a) Stellen Sie die Schrödingergleichung für das System auf. (1 Punkt)

(b) Versuchen Sie, die Ortskoordinate und die Energie so zu skalieren, dass die Schrödingergleichung die ursprüngliche (reskalierte) Form des Wasserstoffatom-Problems erhält. (1 Punkt)

(c) Um welchen Faktor vergrößert sich die Ausdehnung der Wellenfunktionen und um welchen Faktor senken sich die Energieeigenwerte ab? (1 Punkt)

(d) Die Dielektrizitätskonstanten von Silizium und Galliumarsenid betragen $\epsilon_{\text{Si}} \approx 12$ und $\epsilon_{\text{GaAs}} \approx 13$. Die effektiven Massen der Elektronen (n) und Löcher (p) betragen $m^{*n}_{\text{Si}} \approx 1\, m_0$, $m^{*n}_{\text{GaAs}} \approx 0.07 m_0$ und $m^{*p}_{\text{Si}} \approx 0.8\, m_0$, $m^{*p}_{\text{GaAs}} \approx 0.5\, m_0$, wobei m_0 die freie Elektronenmasse bezeichnet. Bestimmen Sie hieraus die typischen Bindungsenergieen von Dotierniveaus. (1 Punkt)

12.5 Elektrischer Transport und Wärmetransport in Metallen und Halbleitern

Vergleichen Sie Metalle und Halbleiter hinsichtlich ihrer elektrischen und thermischen Transporteigenschaften.

(a) Skizzieren Sie die Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands für ein Metall und für einen intrinsischen Halbleiter. Welches sind die charakteristischen Temperaturabhängigkeiten, die Größenordnungen der Absolutwerte und welches sind die physikalischen Ursachen für die unterschiedlichen Beiträge? (2 Punkte)

(b) Diskutieren Sie dasselbe für die thermische Leitfähigkeit von Metallen und Halbleitern bzw. Isolatoren. (2 Punkte)