

Theoretische Festkörperphysik — SS2008

Übungszettel 1

(Abgabe Do 24.04.08, Besprechung 25.04.08, 1.Übung am 18.04.08)

1.1. Kristallgitter und Blochtheorem

(6 Punkte)

Betrachte Elektronen in einem starren Ionengitter, die nicht untereinander, sondern nur mit dem Gitterpotential $U(\mathbf{r})$ wechselwirken, welches die Periodizität des zugrundeliegenden Bravaisgitters hat, und somit die Bedingung $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ für alle Gittervektoren \mathbf{R} des Bravaisgitters erfüllt.

Ein dreidimensionales Bravaisgitter besteht hierbei aus allen Punkten, deren Ortsvektoren \mathbf{R} von der Form

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

sind.

Dabei bezeichnen \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 und \mathbf{a}_3 die Grundvektoren, die das Gitter aufspannen und die n_1, n_2 und n_3 nehmen ganzzahlige Werte an.

a) Das **Blochsche Theorem** besagt:

Die Eigenfunktionen der Wellengleichung für ein periodisches Potential $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ sind das Produkt aus einer ebenen Welle $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ und einer Funktion $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ mit der Periodizität des Gitters $u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$:

$$\Psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$$

Das Blochsche Theorem wird manchmal auch folgendermaßen formuliert:

Die Eigenzustände von H können so gewählt werden, dass ein jedem Ψ zugeordneter Wellenvektor \mathbf{k} existiert, der die Bedingung

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \Psi(\mathbf{r})$$

für jeden Vektor \mathbf{R} des Bravaisgitters erfüllt.

Wir möchten dieses Theorem jetzt beweisen und gehen dafür in mehreren Schritten vor:

i) Wir definieren uns einen Translationsoperator $T_{\mathbf{R}}$, der das Argument einer Funktion $f(\mathbf{r})$ um \mathbf{R} verschiebt.

$$T_{\mathbf{R}}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

Da der Translationsoperator mit H vertauscht, besitzen H und $T_{\mathbf{R}}$ gemeinsame Eigenzustände:

$$\begin{aligned} H\Psi &= \epsilon\Psi \\ T_{\mathbf{R}}\Psi &= c(\mathbf{R})\Psi \end{aligned}$$

Zeigen Sie, dass für die Eigenwerte des Translationsoperators gilt:

$$c(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}')$$

ii) Seien nun \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 und \mathbf{a}_3 drei primitive Vektoren des Bravaisgitters.

Zeigen Sie, dass für einen allgemeinen Vektor des Bravaisgitters ($\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$) gilt:

$$c(\mathbf{R}) = c(\mathbf{a}_1)^{n_1}c(\mathbf{a}_2)^{n_2}c(\mathbf{a}_3)^{n_3}$$

iii) Wir schreiben die $c(\mathbf{a}_i)$, für eine geeignete Wahl von x_i , in der Form

$$c(\mathbf{a}_i) = e^{2\pi i x_i}$$

und benutzen einen Satz primitiver Gittervektoren des reziproken Gitters, für die gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_i\mathbf{a}_j &= 2\pi\delta_{ij} \\ \mathbf{k} &= x_1\mathbf{b}_1 + x_2\mathbf{b}_2 + x_3\mathbf{b}_3 \end{aligned}$$

Folgern Sie damit aus ii), dass gilt:

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{r})$$

b) Betrachte das sogenannte "tight binding-Modell" für Elektronen auf einem kubischen Gitter. Der Hamiltonoperator lautet in zweiter Quantisierung:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

Wobei $c_{i\sigma}^\dagger$ ein Elektron mit Spin σ am Gitterplatz i erzeugt und $c_{j\sigma}$ der entsprechende Vernichtungsoperator am Gitterplatz j ist. $\langle i,j \rangle$ bedeutet Summation über nächste

Nachbarn. Das bedeutet, der Hamiltonoperator beschreibt das Hüpfen eines Elektrons mit dem Spin σ vom Gitterplatz \mathbf{R}_j zum Gitterplatz \mathbf{R}_i .

Die Operatoren im Orts- und Impulsraum sind über eine diskrete Fouriertransformation miteinander verknüpft, wobei N die Anzahl der Gitterplätze ist:

$$a_{i\sigma} = \sum_k^{1.BZ} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} a_{i\sigma}$$

Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator durch Fouriertransformation in den \mathbf{k} -Raum diagonalisiert wird und geben Sie die Energieeigenwerte $\epsilon(\mathbf{k})$ an.

1.2. Zustandsdichte (6 Punkte)

Die Zustandsdichte $N(\omega)$ ist definiert als die Anzahl der Zustände pro Energieintervall

$$N(\epsilon) = \frac{dn}{d\epsilon}$$

Wir betrachten freie Elektronen mit der Dispersion $\epsilon(\mathbf{k}) = \mathbf{k}^2/(2m)$ in einem Kasten mit Volumen V und Seitenlänge L . Berechnen Sie die Zustandsdichte für 1, 2 und 3 Dimensionen.

1.3. Eigenschaften der Greens-Funktion (6 Punkte)

Die retardierte Greens-Funktion wurde in der Vorlesung definiert als:

$$G^R(t-t') = -\frac{1}{Z_G} \theta(t-t') \text{tr} [e^{-\beta(H-\mu N)} \{c(t), c^\dagger(t')\}]$$

a) Zeigen Sie, dass für den Imaginärteil der retardierten Greens-Funktion gilt:

$$-\frac{1}{\pi} \int \text{Im}\{G^R(\omega)\} d\omega = 1$$

wobei $G(\omega)$ die fouriertransformierte, energieabhängige Greens-Funktion ist.

b) Sei die Spektralfunktion $A(\omega)$ nur auf einem endlichen Träger von Null verschieden, d.h.:

$$A(\omega) = 0 \quad \text{für} \quad \omega < \omega_{min}$$

$$A(\omega) \neq 0 \quad \text{für} \quad \omega_{min} < \omega < \omega_{max}$$

$$A(\omega) = 0 \quad \text{für} \quad \omega > \omega_{max}$$

Zeigen Sie, dass dann für $\omega \rightarrow \infty$ für die Greens-Funktion gilt

$$G(\omega) \rightarrow \frac{1}{\omega}$$

indem Sie die Spektraldarstellung

$$G(\omega)^R = \int \frac{A(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} d\omega'$$

der retardierten Greens-Funktion benutzen und die Normierung der Spektralfunktion

$$\int A(\omega) d\omega = 1$$

ausnutzen.