Universität Bonn
Physikalisches Institut
Prof. Dr. H. Kroha, T. Langenbruch
http://www.th.physik.uni-bonn.de/th/Groups/kroha

15.04.2008

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 $exp(i\mathbf{kr})$ und einer Funktion $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ mit der Periodizität des Gitters $u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$:

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

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

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

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:

$$c(\mathbf{R}) \;=\; c(\mathbf{a_1})^{\mathbf{n_1}}\mathbf{c}(\mathbf{a_2})^{\mathbf{n_2}}\mathbf{c}(\mathbf{a_3})^{\mathbf{n_3}}$$

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:

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

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

$$H \;=\; -t\sum_{<i,j>} c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}$$

Wobei $c^{\dagger}_{i\sigma}$ ein Elektron mit Spin σ am Gitterplatz i erzeugt und $c_{j\sigma}$ der entsprechende Vernichtungsoperator am Gitterplatz j ist. $< i, j >$ 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:

$$\begin{aligned} a_{i\sigma} &= \sum_{k}^{1.BZ} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R_i}} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ c_{\mathbf{k}\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R_i}} a_{i\sigma} \end{aligned}$$

Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator durch Fouriertransformation in den 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:

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

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

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

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.:

$$\begin{aligned} &A(\omega) = 0 \quad \text{für} \quad \omega < \omega_{min} \\ &A(\omega) \neq 0 \quad \text{für} \quad \omega_{min} < \omega < \omega_{max} \\ &A(\omega) = 0 \quad \text{für} \quad \omega > \omega_{max} \end{aligned}$$

Zeigen Sie, das dann für $\omega \to \infty$ für die Greens-Funktion gilt

$$G(\omega) \quad \to \quad \frac{1}{\omega}$$

indem Sie die Spektraldarstellung

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

der retardierten Greens-Funktion benutzen und die Normierung der Spektralfunktion

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

ausnutzen.