Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie WS 13/14

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler

Blatt 2
Besprechung, 11.11.13

---

1. Thermodynamik des zweidimensionalen Elektronengases (8 Punkte)

(a) (3 Punkte) Drücken Sie für ein zweidimensionales Elektronengas (Fläche A) das großkanonische Potential als als Funktion des chemischen Potentials μ und der Temperatur T aus. Berechnen Sie hieraus explizit die mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle (\mu)$ für $T = 0$. *Hinweis:* Bilden Sie den Grenzwert $T \to 0$ vor der Integration.

(b) (5 Punkte) Die Fermienergie ε_F ist definiert als $\varepsilon_F \equiv \mu(T = 0)$. Bestimmen Sie die mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle$ allgemein als Funktion des chemischen Potentials und der Temperatur. *Hinweis*: Das Integral $\int_a^b \mathrm{d}x \frac{1}{(e^x+1)}$ kann mit Hilfe der Substitution $e^x = t$ berechnet werden.

Verwenden Sie nun das Ergebnis für $\langle N \rangle (\varepsilon_F)$ aus Teilaufgabe a) um das chemische Potential als Funktion der Temperatur T und der Fermienergie ε_F auszudrücken.

Betrachten Sie die Grenzfälle $k_\mathrm{B}T \ll \varepsilon_F$ und $k_\mathrm{B}T \gg \varepsilon_F$. Für welche Temperatur wird $\mu = 0$? Skizzieren Sie $\mu(T)$.

2. Zweite Quantisierung: (2 Punkte)

Seien $c^\dagger$ ein Fermion- und $b^\dagger$ ein Bose-Erzeugungsoperator. Berechnen Sie $\{c^\dagger c\ , c^\dagger\}$, $\{c^\dagger c\ , c\ \}$, $[b^\dagger b\ , b^\dagger]$ und $[b^\dagger b\ , b\ ]$.

3. Zweite Quantisierung – Dichtekorrelationen. (6 Punkte)

Der Operator für die Dichtefluktuationen eines fermionischen spinlosen Quantengases hat in zweiter Quantisierung die Form

$$\delta n(\vec{r}) \equiv n(\vec{r}) - \bar{n} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}'} e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')} \quad \text{wobei } \bar{n} \equiv \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \quad . \tag{1}$$

(a) (3 Punkte)Benutzen Sie Gl. (1) sowie die im Falle $\vec{k} \neq \vec{l}$, $\vec{k}' \neq \vec{l}'$ gültige Identität $\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{l}} c^\dagger_{\vec{k}'} c_{\vec{l}'} \rangle = \delta_{\vec{k},\vec{l}'}\, \delta_{\vec{l},\vec{k}'}\, \langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \rangle \langle c_{\vec{l}} c^\dagger_{\vec{l}} \rangle$, um zu zeigen, dass die Dichtekorrelationsfunktion für freie Elektronen in drei Raumdimensionen die Form $\langle \delta n(\vec{r})\, \delta n(\vec{0}) \rangle = \langle \bar{n} \rangle \delta(\vec{r}) + g(|\vec{r}|)$ hat, wobei

$$g(|\vec{r}|) = - \left| \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \langle c^\dagger_{\vec{k}}\, c_{\vec{k}} \rangle\, e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}} \right|^2 \quad . \tag{2}$$

(b) (3 Punkte) Berechnen und skizzieren Sie $g(|\vec{r}|)$ bei $T = 0$ für ein entartetes Fermigas freier Elektronen mit chemischem Potential $\mu \equiv \epsilon_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2 k_\mathrm{F}^2}{2m}$.

(c) (Extra) Widerholen sie Aufgabenteil b) für die Dichtefluktuationen eines bosonischen Quantengases.

4. Tight-Binding-Modell (4 Punkte)

Die Eigenschaften von Festkörpern werden dominiert durch ihre periodische Gitterstruktur. Gittermodelle sind damit ein naheliegender Ansatz der Modellierung dieser Systeme. Ein einfaches dieser Modelle ist das Tight-Binding-Modell zur Beschreibung von Leitungselektronen:
Fermionen auf einem Gitter werden dabei beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}' \rangle} \sum_{\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{r},\sigma} c_{\mathbf{r}',\sigma} + h.c. \qquad t > 0,$$

mit fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c^{\dagger}, c$ und dem „Hopping-Matrixelement“ t. $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ bezeichnet die Summation über benachbarte Gitterplätze, σ den Spin.

(a) (4 Punkte) Betrachten Sie eine eindimensionale Kette mit der Gitterkonstante a, die Gitterplätze sind damit gegeben durch $\mathbf{r} = a \cdot n_x \quad (n_x = 1, 2, \ldots, N; N \to \infty)$. Bringen Sie den Hamilton-Operator auf die Form

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}$$

und bestimmen Sie die Dispersionsrelation $\varepsilon(k_x)$.

(b) (Extra) Betrachten Sie nun ein 3-dimensionales kubisches Gitter mit Gitterkonstante a, mit den N^3 Gitterplätzen $\mathbf{r} = (an_x, an_y, an_z)$. Bringen Sie den Hamilton-Operator wie oben auf Diagonalform und bestimmen Sie auch für diesen Fall die Dispersionsrelation (Bandstruktur) $\varepsilon(\mathbf{k})$.