Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie WS 13/14

Prof. Dr. G. Schön

Dr. M. Marthaler

Lösungsvorschlag zu Blatt 1

04.11.2013

1. **Harmonische Kette:** Gegeben ist eine zwei atomige Kette, wobei die zwei verschiedenen Atome sich durch ihre Masse unterscheiden (siehe Bild 1).

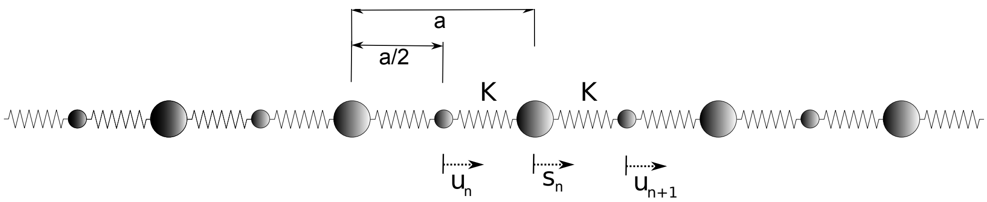


Abbildung 1: Zwei-atomige Kette mit den Atompositionen S_n und U_n

Atome um die Position U_n haben die Masse m_u und entsprechend Atome bei S_n die Masse m_s. Zwischen allen Atomen gilt die selbe Federkonstante K. Aufgrund der angegebenen Strucktur besitzt das System die Periodizität a. Via Lagrange Funktion, Hamilton Funktion oder durch direktes ablesen lassen sich die Bewegungsgleichungen bestimmen.

Es ergeben sich folgende newtonsche Bewegungsgleichungen (in Matrixform):

$$\begin{pmatrix} m_u & 0 \\ 0 & m_s \end{pmatrix} \ddot{z}_n = K\left[\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} z_n + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} z_{n-1} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} z_{n+1}\right] \quad \text{mit } z_n = \begin{pmatrix} u_n \\ s_n \end{pmatrix}$$

die mit Hilfe eines Ansatzes mit ebenen Wellen:

$$u_n(t) = u\, e^{i[kna-\omega t]} \qquad s_n(t) = s\, e^{i[k(na+\frac{a}{2})-\omega t]} \qquad \text{also}$$

Hierbei haben wir einen komplexen Ansatz für die Variable s gewählt, $s \to se^{ika/2}$.

$$z_n(t) = e^{i[kna-\omega t]} \begin{pmatrix} u \\ se^{ik\frac{a}{2}} \end{pmatrix}$$

gelöst werden soll (entgegen dem Übungsblatt verwenden wir ein Reelles s). Die Matrixform der Bewegungsgleichung legt einen solchen Ansatz nahe, da die Struktur einer einatomigen Kette (mit geigneten Koeffizienten) wiederhergestellt wurde: $z_{n-1} - 2z_n + z_{n+1}$.

(a) Zuerst soll bestimmt werden wie die periodischen Randbedingungen sich auf die möglichen Lösungen des Systems auswirken.

Mit der Bedingung der Periodizität bezüglich a folgt:

$$z_{n+N}(t) = z_n(t) \quad \Rightarrow \quad e^{ikNa} = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{k = \frac{2\pi}{a}\frac{m}{N}, m = 0, 1, 2, \ldots, N-1}$$

Die Einschränkung $|m| < N$ folgt aufgrund der Vermeidung doppelt gezählter Zustände. Die Periodizität bezüglich a impliziert das $2N$ Atome als Freiheitsgrade zur Verfügung stehen. Die Zahl der möglichen Zuständen muss demnach ebenfalls $2N$ sein (z_n enthält immer 2 Freiheitsgrade).

Eine Symmetrisierung des Intervalls führt zur Einschränkung: $\boxed{-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}}$.

(b) Unter Verwendung des Ansatzes ergibt sich für die Bewegungsgleichung (re-absorbieren des e^{ika}-Faktors):

$$\left\{K\left[\begin{pmatrix}-2 & e^{ik\frac{a}{2}}\\ e^{-ik\frac{a}{2}} & -2\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & e^{-ik\frac{a}{2}}\\ 0 & 0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & 0\\ e^{ik\frac{a}{2}} & 0\end{pmatrix}\right]+\omega^2\begin{pmatrix}m_u & 0\\ 0 & m_s\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}u\\ s\end{pmatrix}=0$$

und damit die quadratische Gleichung:

$$\left|\begin{pmatrix}\omega^2 m_u - 2K & 2K\cos(k\frac{a}{2})\\ 2K\cos(k\frac{a}{2}) & \omega^2 m_s - 2K\end{pmatrix}\right| = 0 \tag{1}$$

die gelöst wird durch (Siehe Abbildung 2 für die Auftragung von $\omega_\pm(k)$):

$$\begin{aligned}\omega_\pm^2 &= K\frac{m_u+m_s}{m_u m_s} \pm K\sqrt{\left(\frac{m_u+m_s}{m_u m_s}\right)^2 - \frac{4}{m_u m_s}\sin^2(k\frac{a}{2})}\\ &= K\frac{m_u+m_s}{m_u m_s} \pm K\sqrt{\left(\frac{m_u-m_s}{m_u m_s}\right)^2 + \frac{4}{m_u m_s}\cos^2(k\frac{a}{2})}.\end{aligned} \tag{2}$$

Desweiteren sind die dazu gehörenden Eigenmoden von Interesse (die Art der Schwingung). Aus der Determinanten (1) folgt dass:

$$\frac{u}{s} = -\frac{2K\cos(k\frac{a}{2})}{\omega^2 m_u - 2K} \tag{3}$$

gerade die Form der Schwingung angibt.

Im Fall

$|k| \ll \pi/a$ folgt für die Dispersion:

$$\omega_\pm^2 \approx K\frac{m_u+m_s}{m_u m_s}\left[1 \pm \left(1 - \frac{2m_u m_s}{(m_u+m_s)^2}\frac{k^2a^2}{4}\right)\right]$$

also $\omega_+(k) \approx \sqrt{2K\frac{m_u+m_s}{m_u m_s}} - O(k^2)$ und $\omega_-(k) \approx \sqrt{\frac{K}{2(m_u+m_s)}}ka$. Die Form der Schwingung ist dann für stationäre Oszillationen ($k \to 0$):

$$\frac{u}{s} = \begin{cases} -\frac{m_s}{m_u} & \text{für } + \\ 1 & \text{für } - \end{cases}$$

und damit gegenphasig im optischen + Fall, und gleichphasig im akkustischen − Fall.

$|k| \simeq \pi/a$ folgt für die Dispersion:

$$\omega_\pm^2 = \frac{K}{m_u m_s}\left[m_u + m_s \pm |m_u - m_s|\right]$$

Der Sprung zwischen akkustischer und optischer Mode ist damit $\sim 2K\frac{|m_u-m_s|}{m_u m_s}$. Im Fall gleicher Massen liegt bei π/a eine Entartung vor die daher rührt, dass die Brillouin Zone künstlich vergrößert wurde (a statt $a/2$).

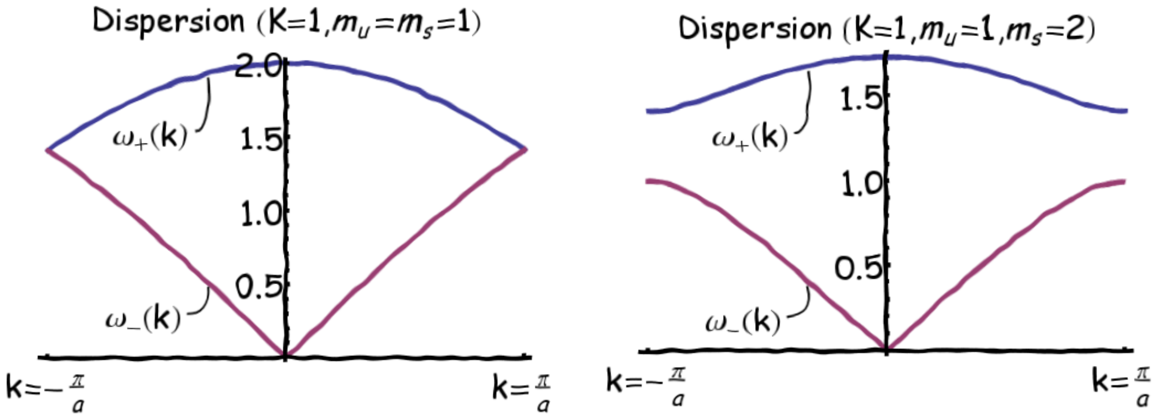


Abbildung 2: **Links** Entarteter Fall: optische und akkustische Moden über k aufgetragen. **Rechts** Entartung aufgelöst: Optische und akkustische Moden als separierte Energiebänder über k aufgetragen.

(c) Die Moden der Kette seien mit λ bezeichnet, also $\lambda \equiv (k, \pm)$, $(\pm)$ steht für optisch/akustisch, mit den entsprechenden Eigenfrequenzen ω_λ. Jeder Mode λ wird nun ein harmonischer Oszillator zugeordnet.

Für jede Mode:

$$\lambda: \quad H_\lambda = \hbar\omega_\lambda(a_\lambda^\dagger a_\lambda + 1/2) \ , \quad H_\lambda|n_\lambda\rangle = \hbar\omega_\lambda(n_\lambda + 1/2)|n_\lambda\rangle \ , \quad n_\lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

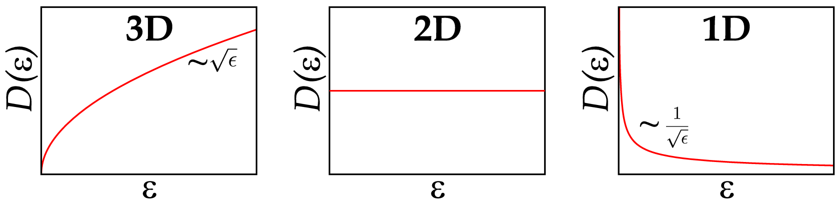
2. Zustandsdichte:

$$D(\epsilon) = \sum_{\vec{p}} \delta\left(\epsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m}\right)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{V}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d p \, \delta\left(\epsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m}\right) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^d}\Omega_d \int dp \, p^{d-1}\delta\left(\epsilon - \frac{\vec{p}^2}{2m}\right)$$

$$= \frac{V\Omega_d}{(2\pi\hbar)^d}\frac{(2m)^{d/2}}{2}\epsilon^{\frac{d}{2}-1} = \frac{V}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{d/2}\epsilon^{\frac{d}{2}-1}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma(1) = 1, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$



(Bem: $\Omega_1 = 2$, $\Omega_2 = 2\pi$, $\Omega_3 = 4\pi$)

3. Tight-Binding Model Nach Anwendung der relevanten Symmetrieeigenschaften ist die Tight-Binding Form der Energie des s-Bands gegeben durch

$$\epsilon(\mathbf{k}) = E_s - \beta - \sum_{\text{n.n.}} \gamma(\mathbf{R}) \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{R} \tag{4}$$

wobei 'n.n.' bedeutet das über die Vektoren $\mathbf{R}$ summiert wird, die den Ursprung des Bravais-Gitters mit seinen nächsten Nachbarn verbindet. Für ein flächenzentriertes Gitter sind diese Vektoren gegeben durch,

$$\mathbf{R} = \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, 0) \ , \ \frac{a}{2}(\pm 1, 0, \pm 1) \ , \ \frac{a}{2}(\pm 0, \pm 1, \pm 1) \, . \tag{5}$$

Damit ergeben sich 12 Werte für $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = \frac{a}{2}(\pm k_i \pm k_j), \ \ i, j = x, y; y, z; z, x \, . \tag{6}$$

Die Überlappintegrale sind gegeben durch,

$$\begin{aligned} \beta &= -\int d\mathbf{r} \Delta U(x, y, z) |\phi(x, y, z)|^2 \, , &(7)\\ \gamma(\mathbf{R}) &= -\int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \, . &(8) \end{aligned}$$

Für ein kubisches Gitter hat $\Delta U(\mathbf{r}) = \Delta U(x, y, z)$ auch kubische Symmetrie. Dementprechend bleibtes gleich unter Permutation und Vorzeichenwechsel der Argumente. Somit brauchen wir nur ein Überlappintegrale berechnen,

$$\gamma = -\int d\mathbf{r} \phi^*(x, y, z) \Delta U(x, y, z) \phi(x - a/2, y - a/2, z) \, . \tag{9}$$

Um Gl. 4 weiter zu vereinfachen stellen wir fest das es in der Summe immer 2 Paare folgender Form gibt,

$$\cos\left(\frac{a}{2}(k_i + k_j)\right) + \cos\left(\frac{a}{2}(k_i - k_j)\right) = 2 \cos \frac{1}{2} a k_i \cos \frac{1}{2} a k_j \tag{10}$$

Damit ergbit sich nun,

$$\epsilon(\mathbf{k}) = E_s - \beta - 4\gamma(\cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) + \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2) + \cos(k_z a/2) \cos(k_x a/2)) \tag{11}$$

(a) Entlang der Richtung ΓX ($k_y = k_z = 0$, $k_x = 2\pi\mu/a$, $0 \leq \mu \leq 1$):

$$\epsilon(\mathbf{k}) = E_s - \beta - 4\gamma(\cos(\pi\mu) + 1 + \cos(\pi\mu)) = E_s - \beta - 4\gamma(1 + 2\cos\pi\mu) \, . \tag{12}$$

(b) Entlang der Richtung ΓL ($k_x = k_y = k_z = 2\pi\mu/a$, $0 \leq \mu \leq 1/2$):

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k}) &= E_s - \beta - 4\gamma(\cos(\pi\mu)\cos(\pi\mu) + \cos(\pi\mu)\cos(\pi\mu) + \cos(\pi\mu)\cos(\pi\mu)) \\ &= E_s - \beta - 12\gamma \cos^2 \mu\pi \, . &(13) \end{aligned}$$

(c) Entlang der Richtung ΓK ($k_z = 0$, $k_x = k_y = 2\pi\mu/a$, $0 \leq \mu \leq 3/4$):

$$\epsilon(\mathbf{k}) = E_s - \beta - 4\gamma(\cos(\pi\mu)\cos(\pi\mu) + \cos(\pi\mu) + \cos(\pi\mu)) = E_s - \beta - 4\gamma(\cos^2 \mu\pi + 2\cos\mu\pi) \, . \tag{14}$$