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 2
11.11.2013

---

1. Chemisches Potential für zweidimensionales Elektronengas:

(a) Das Großkanonische Potential des Fermi-Gases ist gegeben über die Zustandsumme

$$\Omega(T,V,\mu) = -kT \ln Z_G = -kT \sum_\lambda \ln\left[1 + e^{-(\varepsilon_\lambda-\mu)/kT}\right],$$

und die Teilchenzahl die partielle Ableitung nach dem chemischen Potential

$$\begin{aligned}\langle N\rangle = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} &= kT\sum_\lambda \frac{1}{kT}\frac{e^{-(\varepsilon_\lambda-\mu)/kT}}{1+e^{-(\varepsilon_\lambda-\mu)/kT}} \\ &= \sum_\lambda \frac{1}{e^{(\varepsilon_\lambda-\mu)/kT}+1} = \sum_\lambda f(\varepsilon_\lambda).\end{aligned}$$

Die Teilchenzahl ist also gegeben durch die besetzten Zustände, beschrieben durch die Fermi-Verteilung $f(\varepsilon)$. Mit Hilfe der Zustandsdichte lässt sich die Summe als Energie-Integral ausdrücken

$$N = \langle\hat{N}\rangle = \int \mathrm{d}\varepsilon\, D(\varepsilon) f(\varepsilon) = D_{2d}\int \mathrm{d}\varepsilon\, f(\varepsilon). \tag{1}$$

da die zwei-dimensionalen Zustandsdichte konstant ist, gegeben durch

$$D_{2d} = (2s+1)\frac{A}{(2\pi)^2}\frac{2\pi m}{\hbar^2},$$

somit ergibt sich im Grenzfall tiefer Temperaturen

$$N = D_{2d}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\, \theta(\mu-\epsilon) = D_{2d}\,\mu \quad \text{wobei} \quad f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon-\mu}{kT}}+1} \xrightarrow{T\to 0} \theta(\mu-\varepsilon) \tag{2}$$

verwendet wurde.

(b) Aus der vorhergehenden Rechnung (Gl.(1)) folgt für endliche Temperaturen:

$$N = D_{2d}kT\int_{-\frac{\mu}{k_BT}}^\infty \frac{\mathrm{d}z}{e^z+1}.$$

Mit Hilfe des Hinweises ergibt sich:

$$\int_a^b \frac{\mathrm{d}z}{e^z+1} \overset{(e^z=t)}{=} \int_{t_a}^{t_b}\frac{\mathrm{d}t}{t(t+1)} = \int_{t_a}^{t_b}\mathrm{d}t\left(\frac{1}{t}-\frac{1}{t+1}\right) = \ln\frac{t}{t+1}\bigg|_{t_a}^{t_b} = \ln\left(\frac{1}{e^{-z}+1}\right)\bigg|_a^b$$

und damit

$$\boxed{N = D_{2d}\, kT \ln\left(1 + e^{\frac{\mu}{kT}}\right)}\,.$$

Wir wollen nun das die mittlere Teilchenzahl für alle Temperaturen konstant bleibt und suchen ein $\mu(T)$ das dies erfüllt. Unter Verwendung des Ergebnisses aus Aufgabe a) und der Annahme konstanter Teilchenzahl folgt ($\mu(T=0) = \varepsilon_\mathrm{F}$):

$$\varepsilon_\mathrm{F} = kT \ln\left(1 + e^{\frac{\mu}{kT}}\right) \rightarrow \boxed{\mu(T) = kT \ln\left(e^{\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}} - 1\right)}$$

und somit $\boxed{T_{\mu=0} = \dfrac{\varepsilon_\mathrm{F}}{k \ln 2}}$.

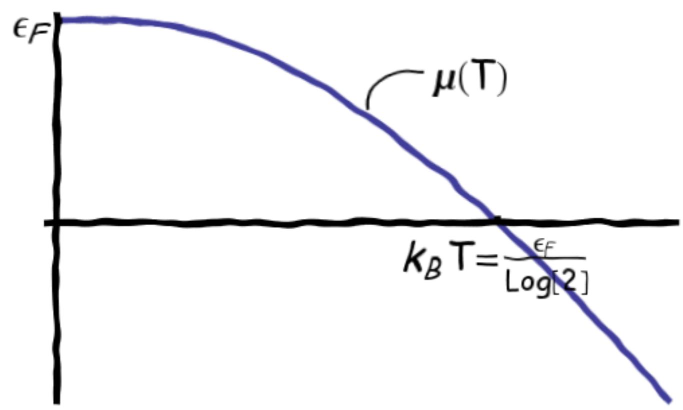
Betrachtet man die Temperaturgrenzfälle so findet man

$$\underline{kT \ll \varepsilon_\mathrm{F}:} \quad \ln\left(e^{\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}} - 1\right) = \frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT} + \ln\left(1 - e^{-\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}}\right) \approx \frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT} - e^{-\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}}$$

$$\mu(T) \approx \varepsilon_\mathrm{F} - kTe^{-\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}} = \varepsilon_\mathrm{F} - \mathcal{O}\left(e^{-\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}}\right)$$

$$\underline{kT \gg \varepsilon_\mathrm{F}:} \quad \ln\left(e^{\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}} - 1\right) \approx \ln\left[\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT} + \frac{1}{2!}\left(\frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{kT}\right)^2 + \ldots\right]$$

$$\mu(T) \approx -kT \ln\frac{kT}{\varepsilon_\mathrm{F}}$$



2. Zweite Quantisierung:

Seien $c^\dagger$ ein Fermion- und $b^\dagger$ ein Bose-Erzeugungsoperator. Zu berechnen ist $\{c^\dagger c\ ,c^\dagger\}$, $\{c^\dagger c\ ,c\ \}$, $[b^\dagger b\ ,b^\dagger]$ und $[b^\dagger b\ ,b\ ]$.

$$\begin{aligned}
I)\,\{c^\dagger c, c^\dagger\} &= c^\dagger c c^\dagger + c^\dagger c^\dagger c = c^\dagger\{c, c^\dagger\} = c^\dagger && (3)\\
II)\,\{c^\dagger c, c\} &= c^\dagger c c + c c^\dagger c = \{c, c^\dagger\}c = c && (4)\\
III)\,[b^\dagger b, b^\dagger] &= b^\dagger b b^\dagger - b^\dagger b^\dagger b = b^\dagger[b, b^\dagger] = b^\dagger && (5)\\
IV)\,[b^\dagger b, b] &= b^\dagger b b - b b^\dagger b = -[b, b^\dagger]b = -b && (6)
\end{aligned}$$

3. Zweite Quantisierung – Dichtekorrelationen.

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

$$\delta n(\vec{r}) \equiv n(\vec{r}) - \bar{n} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}\neq\vec{k}'} c^\dagger_{\vec{k}}\, c_{\vec{k}'}\, e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')} \quad \text{wobei } \bar{n} \equiv \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}}\, c_{\vec{k}} \quad . \tag{7}$$

(a) Es ist zu zeigen dass Gl. (7) mit der im Falle $\vec{k} \neq \vec{l}$, $\vec{k}' \neq \vec{l}'$ gültige Identität $\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{l}} c^\dagger_{\vec{k}'} c_{\vec{l}'}\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{l}'}\,\delta_{\vec{l},\vec{k}'}\,\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle\langle c_{\vec{l}} c^\dagger_{\vec{l}}\rangle$, 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

$$g(|\vec{r}|) = -\left|\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\langle c^\dagger_{\vec{k}\sigma}\, c_{\vec{k}\sigma}\rangle\, e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}}\right|^2 \quad . \tag{8}$$

Der Korrleator ist gegeben durch,

$$\begin{aligned}
\langle \delta n(\vec{r})\,\delta n(\vec{0})\rangle &= \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}\neq\vec{k}'}\sum_{\vec{q}\neq\vec{q}'} e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}\langle c^\dagger_{\vec{k}}\, c_{\vec{k}'} c^\dagger_{\vec{q}}\, c_{\vec{q}'}\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}\neq\vec{k}'} e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle\langle c_{\vec{k}'} c^\dagger_{\vec{k}'}\rangle \\
&= \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}\neq\vec{k}'} e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle(1-\langle c^\dagger_{\vec{k}'}\, c_{\vec{k}'}\rangle) \qquad (9) \\
&= \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}\neq\vec{k}'} e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle - \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}\neq\vec{k}'} e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')}\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle\langle c^\dagger_{\vec{k}'}\, c_{\vec{k}'}\rangle \\
&= \frac{1}{V}\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle\sum_{\vec{p}\neq 0} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}} - \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}}\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle\sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{r}\cdot\vec{k}'}\langle c^\dagger_{\vec{k}'}\, c_{\vec{k}'}\rangle(1-\delta_{\vec{k}\vec{k}'}) \\
&= \langle\bar{n}\rangle\delta(\vec{r}) - \frac{1}{V^2}\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}}\langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}}\rangle\sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{r}\cdot\vec{k}'}\langle c^\dagger_{\vec{k}'}\, c_{\vec{k}'}\rangle(1-\delta_{\vec{k}\vec{k}'})
\end{aligned}$$

Nun machen wir den Übergang von summation zur integration. Hierbei machen wir eine wichtige Näherung. Wir nehmen an das

$$(1-\delta_{\vec{k}\vec{k}'}) \approx 1 \tag{10}$$

Dies kann dadruch begreundet werden das aus dem Integral immer nur genau ein Punkt entfernt wird. Dies aendert nichts am Wert des Integrals. Allerdings ist diese Ersetzung nur dann erlaubt wenn der Zustand **k** keine Makroskopisch grosse Besetzung hat. Im Aufgabenteil c) werden wir sehen das es fälle gibt in der die obige Ersetzung nicht erlaubt ist.
Nun ergibt sich

$$\langle \delta n(\vec{r})\,\delta n(\vec{0})\rangle = \langle\bar{n}\rangle\delta(\vec{r}) + g(|\vec{r}|) \tag{11}$$

mit

$$g(|\vec{r}|) = -\left|\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\langle c^\dagger_{\vec{k}\sigma}\, c_{\vec{k}\sigma}\rangle\, e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}}\right|^2 \quad . \tag{12}$$

(b) Es ist $g(|\vec{r}|)$ zu berechnen und zu skizzieren. Die Temperatur ist $T = 0$ und wir betrachten ein entartetes Fermigas freier Elektronen mit chemischem Potential $\mu \equiv \epsilon_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2 \vec{k}_\mathrm{F}^2}{2m}$. Hierbei gilt

$$\langle c^\dagger_{\vec{k}}\, c_{\vec{k}} \rangle = \Theta\left(\epsilon_\mathrm{F} - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\right) \tag{13}$$

Hiermit ergibt sich (mit $k_F = \sqrt{2m\epsilon_F/\hbar}$)

$$\begin{aligned}
g(|\vec{r}|) &= -\left| \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \langle c^\dagger_{\vec{k}\sigma}\, c_{\vec{k}\sigma} \rangle\, e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}} \right|^2 && (14)\\
& \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \langle c^\dagger_{\vec{k}\sigma}\, c_{\vec{k}\sigma} \rangle\, e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}} && (15)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk k^2\, 2\pi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta e^{irR\cos\theta} && (16)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} dk k^2 \int_{-1}^{1} dx e^{irkx} && (17)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} dk k^2 \frac{2\sin(rR)}{rR} && (18)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 r^3} \int_0^{k_F r} dy y \sin y && (19)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 r^2} \left[\frac{\sin k_F r}{r} - k_F \cos k_F r \right] && (20)
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}
g(|\vec{r}|) &= -\frac{1}{(2\pi)^4 r^4} \left[\frac{\sin k_F r}{r} - k_F \cos k_F r \right]^2 && (21)\\
&= -\frac{k_F^2}{(2\pi)^4 r^4} \left[\frac{\sin k_F r}{k_F r} - \cos k_F r \right]^2 && (22)\\
& && (23)
\end{aligned}$$

(c) Widerholen sie Aufgabenteil b) für die Dichtefluktuationen eines bosonischen Quantengases:
Einmal ändert sich das Vorzeichen von $g(r)$. Dies ergibt sich aus den Vertauschungsrelation.
Dann muss man bedenken das ein bosonisches Quantengas bei $T = 0$ kondensiert, und somit ist nur der Zustand mit $\vec{k} = 0$ besetzt. Man könnte nur versuch $g(|\vec{r}|)$ mit folgendem Ansatz zu berechnen

$$\langle b^\dagger_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}} \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\vec{k}) n_0 \tag{24}$$

Wobei n_0 die Gesamtzahlt an Teilchen ist und $b_{\vec{k}}$ der Vernichtungsoperators eines Teilchens mit Wellenzahlt $\vec{k}$. Damit ergibt sich,

$$g(|\vec{r}|) = \frac{1}{V^2} n_0^2 \tag{25}$$

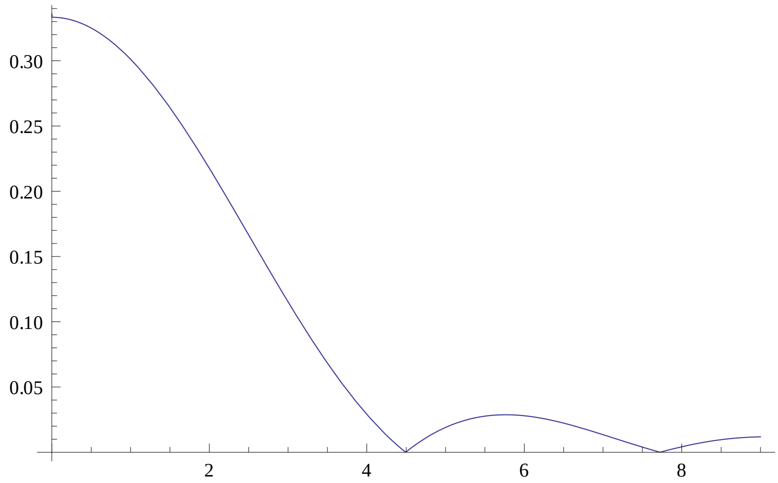


Abbildung 1: $\sqrt{|g(r)|}$ als Funktion von $k_F r$. $g(r)$ fällt extrem scharf ab, deshalb wird die Wurzel von $g(r)$ gezeigt.

Interesanterweise ist das exact $\bar{n}^2$, also entspricht es dem Term der in der Definition von $\delta n(\vec{r})$ abgezogen wurde.

Um zum richtigen Ergebnis zu gelangen muss man sich nochmal dden Übergang von Summation zur Integration anschauen:

$$\langle \delta n(\vec{r})\, \delta n(\vec{0}) \rangle = \langle \bar{n} \rangle \delta(\vec{r}) - \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}} \langle b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} \rangle \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{r}\cdot\vec{k}'} \langle b^\dagger_{\vec{k}'}\, b_{\vec{k}'} \rangle (1 - \delta_{\vec{k}\vec{k}'}) \tag{26}$$

Da nun nur der Zustand mit $\vec{k} = 0$ besetzt ist gilt dementsprechend

$$\frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{k}} \langle b^\dagger_{\vec{k}} b_{\vec{k}} \rangle \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{r}\cdot\vec{k}'} \langle b^\dagger_{\vec{k}'}\, b_{\vec{k}'} \rangle (1 - \delta_{\vec{k}\vec{k}'}) = 0. \tag{27}$$

und damit

$$\langle \delta n(\vec{r})\, \delta n(\vec{0}) \rangle = \langle \bar{n} \rangle \delta(\vec{r}) \tag{28}$$

4. **Tight-Binding-Modell:**

Wir verwenden die Transformation von Wannier- zu Blochzuständen

$$c_{r\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N^D}} \sum_{k}^{BZ} e^{ik\cdot r} c_{k\sigma}^{\dagger} \tag{29}$$

$$c_{r\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N^D}} \sum_{k}^{BZ} e^{-ik\cdot r} c_{k\sigma} \tag{30}$$

$$\tag{31}$$

und erhalten

$$H = -t \sum_{\langle r,r'\rangle,\sigma} c_{r\sigma}^{\dagger} c_{r'\sigma} + c_{r'\sigma}^{\dagger} c_{r\sigma} \tag{32}$$

$$= -\frac{t}{N^D} \sum_{\langle r,r'\rangle,\sigma} \sum_{k,k'}^{BZ} e^{ik\cdot r - ik'\cdot r'} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k'\sigma} + e^{ik'\cdot r' - ik\cdot r} c_{k'\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \tag{33}$$

$$\tag{34}$$

Für eine allgemeine Gitterkonstante $a = (a_1, a_2, \ldots, a_D)$ und $r = (a_1 n_1, a_2 n_2, \ldots, a_D n_D)$ berechnen wir

$$\frac{1}{N^D} \sum_{\langle r,r'\rangle} \sum_{k,k'} e^{ik\cdot r - ik'\cdot r'} = \frac{1}{N^D} \sum_{j=1}^{D} \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{k,k'}^{BZ} e^{ia_j k_j n - ia_j k'_j (n+1)} \tag{35}$$

$$= \frac{1}{N^D} \sum_{j=1}^{D} \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{k,k'}^{BZ} e^{ia_j (k_j - k'_j) n} e^{-ia_j k'_j} \tag{36}$$

$$= \sum_{j=1}^{D} \sum_{k}^{BZ} e^{-ia_j k_j} \quad \text{für } k_j - k'_j = 2\pi/a_j \text{ und } N \to \infty \tag{37}$$

Einsetzen liefert

$$H = -t \sum_{k}^{BZ} \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{D} \left(e^{-ik_j a_j} + e^{ik_j a_j}\right) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \tag{38}$$

$$= -2t \sum_{k}^{BZ} \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{D} \cos(k_j a_j) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \tag{39}$$

Wir finden die Dispersionsrelation

$$\epsilon(k) = -2t \sum_{j=1}^{D} \cos(k_j a_j) \tag{40}$$