NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Alex Hansen
Tlf. 93649

KONTINUASJONSEKSAMEN I FAG 74436 KVANTETEORIEN FOR FASTE STOFFER
Mandag 24. august, 1998
kl. 0900–1300

Tillatte hjelpemidler: Rottmann: Matematische Formelsammlung
Rottmann: Matematisk formelsamling
Barnett and Cronin: Mathematical Formulae
Godkjent kalkulator

Oppgave 1

Anta et elektron beveger seg i et éndimensjonalt periodisk potensial $U(x)$ med periodisitet a.

Blochs teorem sier at bølgefunksjonen til dette elektronet kan skrives på formen

$$\psi_{nk}(x) = e^{ikx} u_{nk}(x) \tag{1}$$

hvor $u_{nk}(x + ma) = u_{nk}(x)$, m er et helt tall. De tilhørende energi-egenverdiene er E_{nk}.

a) Vis at Blochs teorem også kan uttrykkes på formen

$$\psi_{nk}(x + ma) = e^{ikma} \psi_{nk}(x) \,. \tag{2}$$

b) Gi en tolkning av kvantetallene n og k.

c) Vis at k er begrenset til å ligge i første Brillouin sone, $-\pi/a < k < \pi/a$.

Anta nå at det periodiske potensialet er sterkt slik at elektronet er bundet til potensialets minima (tight-binding model). Under disse forhold kan bølgefunksjonen approksimeres som

$$\psi_{nk}(x) = \sum_m e^{ikma}\phi_n(x - ma) \ . \tag{3}$$

d) Begrunn denne approksimasjonen og gi en tolkning av $\phi_n(x)$. Hva slags fysisk system ville man beskrive med denne modellen og approksimasjonen? Hva representerer $\phi_n(x)$ i dette tilfellet?

La oss nå se på den motsatte grensen: Vi lar potensialet $U(x)$ gå mot null. Energi-egenfunksjonene er i denne grensen $\psi_k(x) = \exp(ikx)$ og de tilhørende energi-egenverdiene er $E_k = k^2/2m$ hvor m her er massen til elektronet.

Så lenge potensialet $U(x)$ ikke er identisk lik null, kan i følge Blochs teorem bølgefunksjonen skrives på formen (1). Siden grenseovergangen $U(x) \to 0$ er konitunerlig, må det også være mulig å skrive bølgefunskjonen $\psi_k(x) = \exp(ikx)$ på denne formen.

e) Gjør det. Hva er tolkningen av kvantetallet n i dette tilfellet?

f) Skisser energien E_{nk} i første Brillouin sone i denne grensen, $U(x) \to 0$.

g) Vis at båndgapet mellom bånd n og $n+1$ når $U(x)$ er liten men ikke identisk lik null er gitt ved

$$\Delta = 2|\langle\psi_{(n+1)\tilde{k}}|U|\psi_{n\tilde{k}}\rangle|$$

hvor $\tilde{k}$ er 0 eller $\pm\pi/a$.

(Hint: Anta $\psi(x) = a\psi_{nk}(x) + b\psi_{(n+1)k}(x)$ hvor k er nær $\tilde{k}$ og diagonaliser Schrödinger-ligningen for systemet.)

h) Skisser E_{nk} i første Brillouin sone i dette tilfellet ($U(x)$ liten men ikke identisk lik null).

$U(x)$ er fortsatt liten men ikke identisk lik null. Anta videre at det ikke er kun et elektron i systemet, men at det like mange elektroner som minima i potensialet — systemet er halvfylt.

i) Hva er k_F — fermibølgetallet? Hvorfor er systemet halvfylt med dette antallet av elektroner?

Vi antar nå at annenhvert mininum i potensialet blir forskjøvet en liten distanse δ, $ma \to ma + \delta$.

j) Hva skjer med periodisiteten til systemet?

k) Går den totale elektron-energien til systemet opp eller ned som følge av denne forskyvningen?

Oppgave 2

Vi skal i denne oppgaven studere spinnbølger i en éndimensjonal Heisenberg modell. Hamiltonoperatoren for denne er

$$H = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \tag{1}$$

hvor $J > 0$ og $\vec{S} = (S^x, S^y, S^z)$. Vi antar spinnene har kvantetall 1/2.

a) Er koblingen ferromagnetisk eller antiferromagnetisk?

Spinnene $\vec{S}_i$ oppfyller kommutasjonsregelen

$$[S_i^x, S_j^y] = i\delta_{ij} S_i^z \tag{2}$$

og de som fremkommer gjennom syklisk ombytte av x, y og z. Definer operatorene $S_i^+ = S_i^x + iS_i^y$ og $S_i^- = S_i^x - iS_i^y$. Anta videre at tilstandene $|\uparrow_i\rangle$ og $|\downarrow_i\rangle$ er egentilstander for operatoren S_i^z med egenverdier 1/2 og $-1/2$.

b) Vis at $S_i^+|\downarrow_i\rangle = |\uparrow_i\rangle$, $S_i^+|\uparrow_i\rangle = 0$, $S_i^-|\uparrow_i\rangle = |\downarrow_i\rangle$ og $S_i^-|\downarrow_i\rangle = 0$.

Holstein-Primakoff transformasjonen er

$$S_i^z = 1/2 - a_i^\dagger a_i \ , \tag{3}$$

$$S_i^+ = (1 - a_i^\dagger a_i)^{1/2} a_i \tag{4}$$

og

$$S_i^- = a_i^\dagger (1 - a_i^\dagger a_i)^{1/2} \tag{5}$$

hvor $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$, $[a_i, a_j] = 0$ og $[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$.

c) Vis at Hamilton-operatoren (1) i grensen hvor $\langle a_i^\dagger a_i \rangle \ll 1/2$ kan skrives

$$H = E_0 + J \sum_i \left(a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_{i+1} \right) \ . \tag{6}$$

d) Diagonaliser så denne Hamiltonoperatoren gjennom å innføre de Fouriertransformerte til a_i og $a_i^\dagger$ operatorene,

$$a_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_i e^{iqx_i} \tag{7}$$

og

$$a_q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_i^\dagger e^{-iqx_i} \ . \tag{8}$$

Her er N antallet spinn i kjeden og x_i er posisjonen til spinn i.

e) Hva er dispersjonsrelasjonen ω_q til spinnbølgene i denne modellen for små q?

f) Magnetiseringen av systemer er gitt ved

$$M = \langle \sum_i S_i^z \rangle \ . \tag{9}$$

Hvordan avhenger denne av temperaturen T for små T?

(Hint: $\langle a_q^\dagger a_q \rangle = 1/(e^{\omega_q/T} - 1)$.)

<u>Oppgave 3</u>

a) Regn ut elektronpropagatoren $G(\vec{k}, \omega)$ til annen orden i vekselvirkningen mellom elektroner og fononer. Denne er gitt ved

$$V = \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma} M_{\vec{q}} A_{\vec{q}} c^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} c_{\vec{k},\sigma} \tag{1}$$

og

$$A_{\vec{q}} = a_{\vec{q}} + a^\dagger_{\vec{q}} \ . \tag{2}$$

Den frie elektronpropagatoren er

$$G_0(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\vec{k}} + i\delta_{\vec{k}}} \tag{3}$$

og den frie fononpropagatoren er

$$D_0(\vec{q}, \omega) = \frac{2\omega_{\vec{q}}}{\omega^2 - \omega^2_{\vec{q}} + i\delta} \ . \tag{4}$$

(Det er ikke nødvendig å regne ut alle integralene.)