Øving 9, TFY4210 Anvendt Kvantemekanikk, Vår 2006

Oppgave 1
Vi ser på et system av ikke-vekselvirkende elektroner på et kvadratisk gitter. Elektronene er i kontakt med et eksternt partikkel reservoar, slik at antall partikler kan fluktuere, men midlere antall er bestemt av kjemisk potensial μ. Bevegelsen til elektronene er slik at de for det meste er lokaliserte på gitterpunkt, men kan av og til hoppe til et nærliggende gitterpunkt på følgende måte: De kan hoppe til et nærmeste nabo gitterpunkt med tunneleringsamplituden $t > 0$. De kan også hoppe til et nest-nærmeste nabo gitterpunkt med tunneleringsamplituden $t^{'} > 0$. Hamilton-operatoren i tight-binding approksimasjon ser slik ut, i stort kanonisk ensemble:

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma} t\ c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle,\sigma} t^{'}\ c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{i,\sigma}.$$

Her er $(c^{\dagger}_{i,\sigma}, c_{i,\sigma})$ kreasjons- og destruksjons operatorer for elektroner med spinn σ på gitter punkt nummer i. Symbolene $\langle i,j\rangle$ og $\langle\langle i,j\rangle\rangle$ betyr at i,j er henholdsvis nærmeste og nest-nærmeste naboer.
a) Innfør de Fourier-transformerte operatorene

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i c_{i,\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i c^{\dagger}_{i,\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \end{aligned}$$

der N er antall gitterpunkt på det kvadratiske gitteret, til å vise at Hamilton-operatoren kan skrives på formen

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \mu)\ c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}.$$

Bestem derved $\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}$.
b) Bestem Brillouin-sonen til dette gitteret, og skisser den i **k**-rommet.
c) Energien til elektronene danner et energi bånd med maksimale og minimale energier. Finn disse verdiene, og bestem hvor i Brillouin-sonen de kommer fra.
d) La først μ være litt over den minimale verdien energien kan ta, deretter midt i energi-båndet, og til slutt litt under den maksimale verdien energi-båndet kan ta. La Fermi-nivået til systemet ved null temperatur være bestemt av ligningen

$$\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \mu = 0.$$

Skisser Fermi-nivået i **k**-rommet i disse tre tilfellene. Skisser også spesielt Fermi-nivået når μ er midt i energi-båndet for det tilfellet at $t^{'} = 0$.
e) Vi utsetter nå elektronsystemet for et magnetfelt perpendikulært på det kvadratiske gitteret, kall denne retningen z-retningen. Magnetfeltet er da gitt ved $\mathbf{h} = h\ \hat{z}$, som kobler til spinnet $\mathbf{S}$ til elektronene. Dette leder til et Zeeman-ledd i energien gitt ved $-\sum_i \mathbf{h}\cdot\mathbf{S}_i$, der spinn-operatoren til elektronene er gitt ved

$$\mathbf{S}_i = \sum_{\alpha,\beta} \vec{\sigma}_{\alpha,\beta} c^{\dagger}_{i,\alpha} c_{i,\beta},$$

der $\vec{\sigma} = \sigma_1\hat{x} + \sigma_2\hat{y} + \sigma_3\hat{z}$ er vektoren av Pauli-matriser, og α, β er indekser som angir komponentene i Pauli-matrisene. Vis at Hamilton-operatoren da blir gitt ved

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma} t\ c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle,\sigma} t^{'}\ c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{i,\sigma} - h \sum_{i,\sigma} \sigma c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{i,\sigma}.$$

Bestem $\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}$ i dette tilfellet, og gi en kort fysisk forklaring på spinn-avhengigheten til energien.