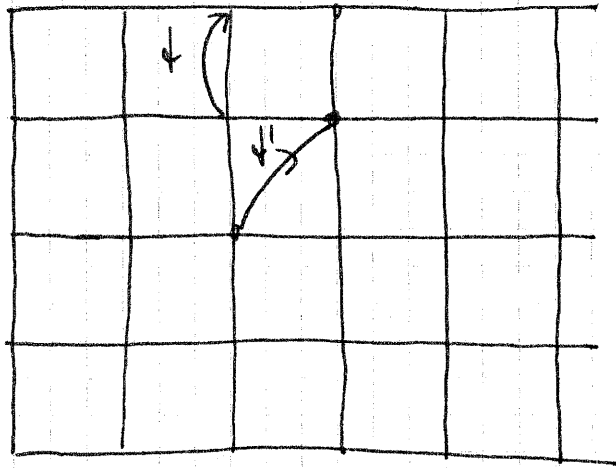


Løsningsforløp, Øving 9, TFY4210 ①

Oppgave 1

$$H = -\psi \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \psi' \sum_{\langle \langle ij \rangle \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$$



Se på et gitt ledd av ψ per

$$\sum_{ij\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

der j er et punkt ~~som~~ med posisjon \vec{r}_j som skiller seg fra \vec{r}_i slik: $\vec{r}_j = \vec{r}_i + \vec{\delta}$

$$\sum_{ij\sigma} = \sum_{\vec{r}_i, \vec{\delta}, \sigma}$$

Da für v_i :

(2)

$$\sum_{\vec{k}_i, \vec{\delta}, \sigma} C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma}$$

$$= \sum_{\vec{k}_i, \vec{\delta}, \sigma} \frac{1}{N} \left\{ \sum_{\vec{k}_1} C_{k_1\sigma}^+ e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_i} \right\} C_{i\sigma}^+ \cdot \left\{ \sum_{\vec{k}_2} C_{k_2\sigma} e^{-i\vec{k}_2 \cdot (\vec{r}_i + \vec{\delta})} \right\} C_{j\sigma}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \sigma} \sum_{\vec{k}_i} \sum_{\vec{\delta}} C_{k_1\sigma}^+ C_{k_2\sigma} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_i} \cdot e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{\delta}}$$

Näherungsweise ist

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_i} e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_i} = \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}$$

Da får vi:

(3)

$$\sum_{\vec{k}, \sigma} \sum_{\vec{\delta}} C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$$

$$= \sum_{\vec{k}, \sigma} \gamma(\vec{k}) C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma}$$

der $\gamma(\vec{k}) = \sum_{\vec{\delta}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$

I vår oppgave har vi to slike ledd:

i) $\vec{\delta}$ er nærmeste nabo vektor.

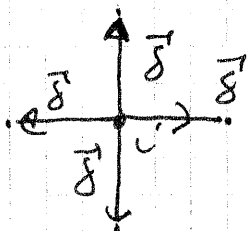
ii) $\vec{\delta}$ er nest-nærmeste $-1-1-1$

i) $\vec{\delta} = (\pm a, \pm a)$ Nærmeste naboer.

$$\gamma(\vec{k}) = e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{iky a} + e^{-iky a}$$

$$= 2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

der $\vec{k} = (k_x, k_y)$.



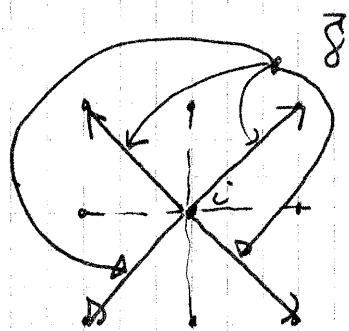
$$\vec{\delta} = (a, 0)$$

$$\vec{\delta} = (0, \pm a)$$

ii)

Næst-nærmeste nabo

(4)



$$\vec{s}_1 = (a, a)$$

$$\vec{s}_2 = (a, -a)$$

$$\vec{s}_3 = (-a, a)$$

$$\vec{s}_4 = (-a, -a)$$

$$\gamma(\vec{r}) = e^{i(k_x + k_y)a} + e^{-i(k_x + k_y)a}$$

$$+ e^{i(k_x - k_y)a} + e^{-i(k_x - k_y)a}$$

$$= 2 \left(\cos[(k_x + k_y)a] + \cos[(k_x - k_y)a] \right)$$

$$= 4 \cos(k_x a) \cdot \cos(k_y a)$$

I tillegg har vi leddet

$$- \mu \sum_{i \neq 0} C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} \quad \text{med dette}$$

leddet er egentlig som de to foregående, men kun ett bidrag i summen for $\vec{s}(\vec{r})$: $\vec{s} = 0 \Rightarrow \gamma(\vec{r}) = 1$

Da får vi for H , til slutt:

(5)

$$H = -2t \sum_{k, \sigma} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

$$+ 4t' \sum_{k, \sigma} [\cos(k_x a) \cos(k_y a)] C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

$$- \mu \sum_{k, \sigma} C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

$$= \sum_{k, \sigma} (E_{k\sigma} - \mu) C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

$$E_{k\sigma} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \\ + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a)$$

I dette tilfellet er $E_{k\sigma}$ uavhengig av spin kvantetallet $\sigma = \pm 1$, slik et energi-båndet er spin-degenerert.

b) Brillouin-sonen er per definisjon rekurs-cellen (Wigner-Seitz cellen) i det minste gitteret. La det neste gitteret være utpunkt av

gitter-vektoren $\vec{R}_1 = a \hat{x}$

$\vec{R}_2 = a \hat{y}$

(6)

of de dit reciproke gitter van
 uitpunt aan de reciproke gittervektoren

\vec{R}_1 of \vec{R}_2 . De w eenheid

gitterpunt is het welke gitterpunt w
 veel

$$\vec{R}_{nm} = n \vec{R}_1 + m \vec{R}_2$$

of eenheid gitterpunt, het reciproke
 gitterpunt w veel

$$\vec{R}_{lkl} = l \vec{R}_1 + k \vec{R}_2$$

de (n, m, l, k) w heelgetal.

\vec{R}_1 of \vec{R}_2 spannen doordel uit
 eenheidsvector (Brillouin-sonen), of de
 w product veel

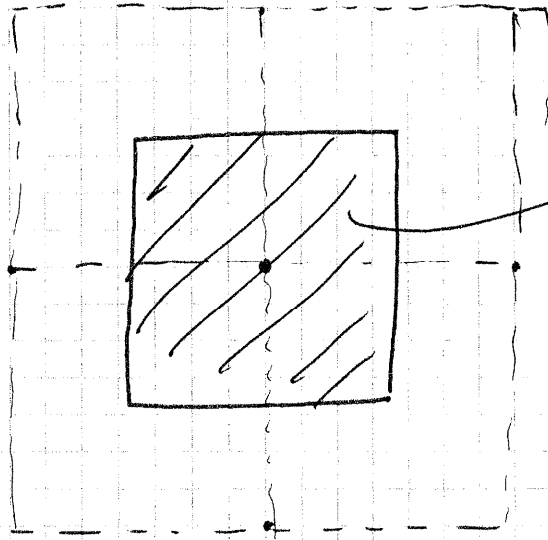
$$\vec{R}_i \cdot \vec{R}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$\vec{R}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{R}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

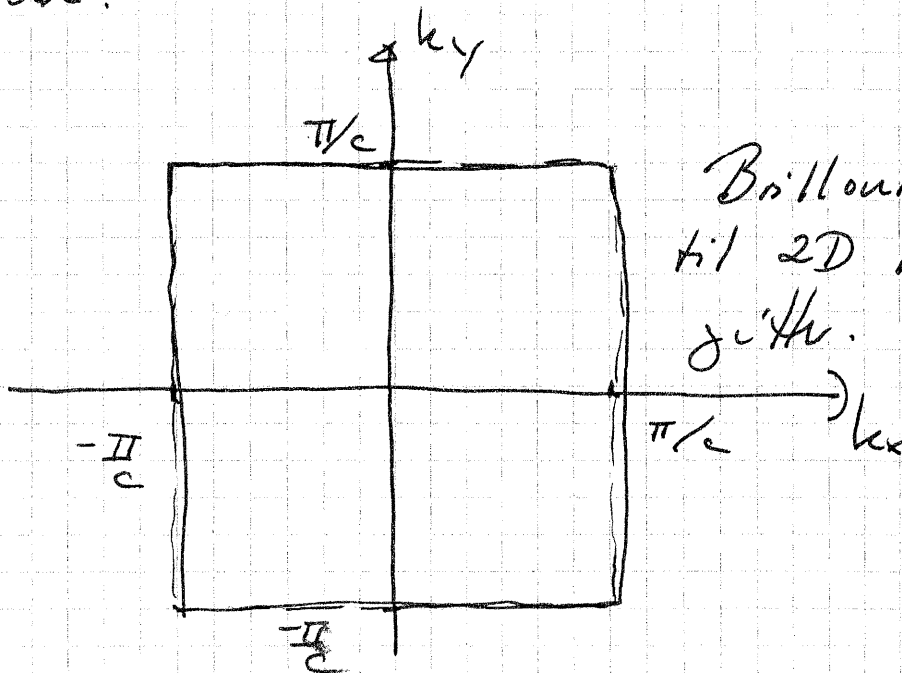
Resiprokt gitter:

7



Enhetscelle!
Vi finner disse ved
å halvere alle
vektore som
forbindes et

gitterpunkt med dets nærmeste
nabor. Dette er derfor Brillouin
soner:



Brillouin-soner
til 2D kvadratisk
gitter.

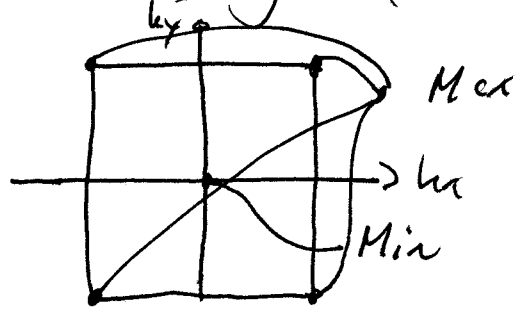
c) Minimet- og maksimal-værdier.

La $\psi > \psi'$:

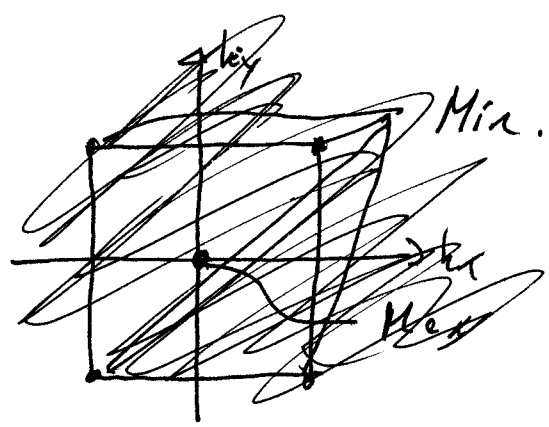
Min: $-4\psi + 4\psi' = -4(\psi - \psi')$ } $\vec{k} = (0, 0)$

Max: $4\psi + 4\psi' = 4(\psi + \psi')$ } $\vec{k} = (\pm \frac{\pi}{2}, \pm \frac{\pi}{2})$

Bånd-bredder: 8ψ



~~La $\psi' > \psi$
Min: $+4\psi + 4\psi'$
Max: $4(\psi - \psi')$~~



Det samme
gjelder for $\psi < \psi'$

d) Vi ser på tilfellet $\psi > \psi'$, siden dette er mest realistisk (Det er nok nødvendig i forbindelse til nærmeste rekke eller til et punkt langs borte.)

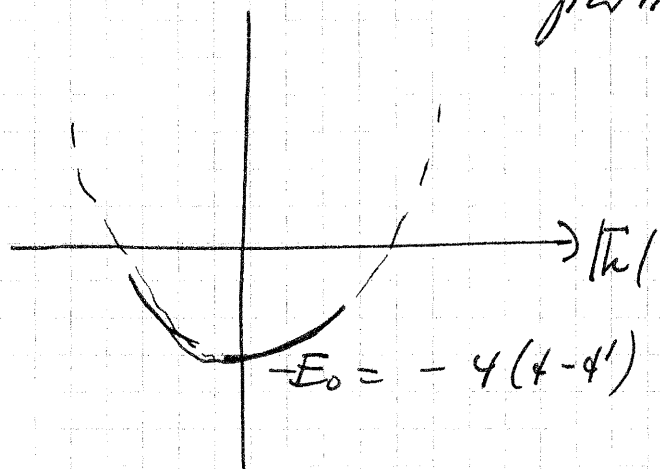
Bruker av båndet er lokalisert ved $k = (0, 0)$, slik at når energien er kun litt over minimum, kan vi rekkeutvikle cos-funksjonen til 2. orden:

$$E_{ho} = -2\phi \left(1 - \frac{1}{2} a^2 (k_x^2 + k_y^2) \right) + 4\phi'$$

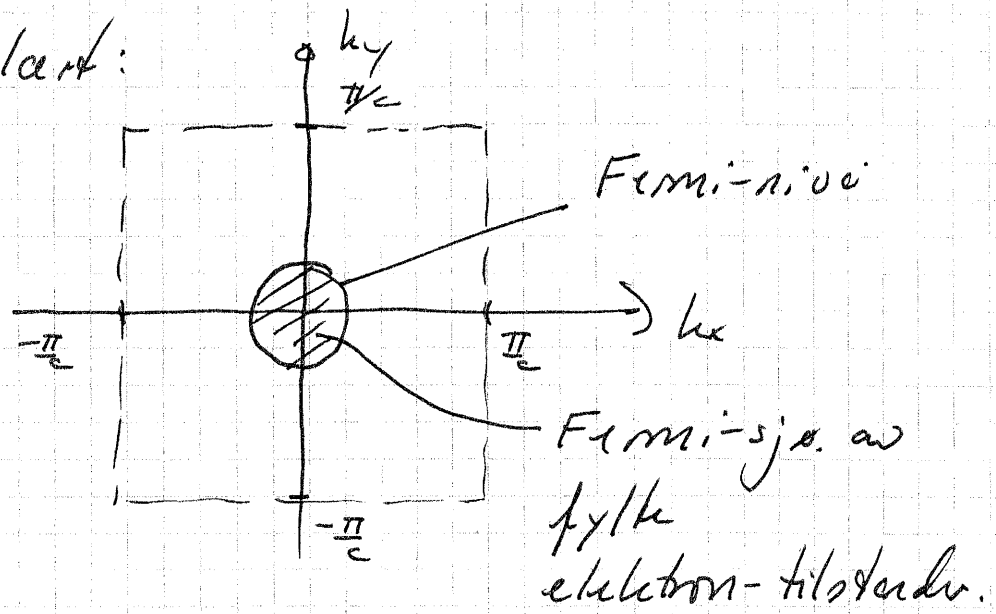
$$= \phi a^2 \vec{k}^2 + 4(\phi' - \phi)$$

$$= E_0 + \frac{\hbar^2}{2m} k^2; \quad \frac{\hbar^2}{2m} = \phi a^2$$

Lide kurvering \Rightarrow effektivt "kugle" partikler



Fermi-niveauet er dermed tilsvarende sirkulært:

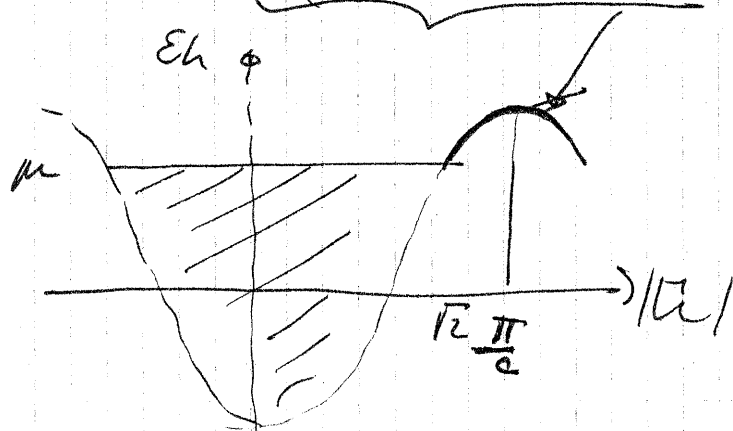


For nster fyldt band, vil Fermi-niveauet ligge nær punkterne

$$k_c = \left(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a} \right) \text{ slik at}$$

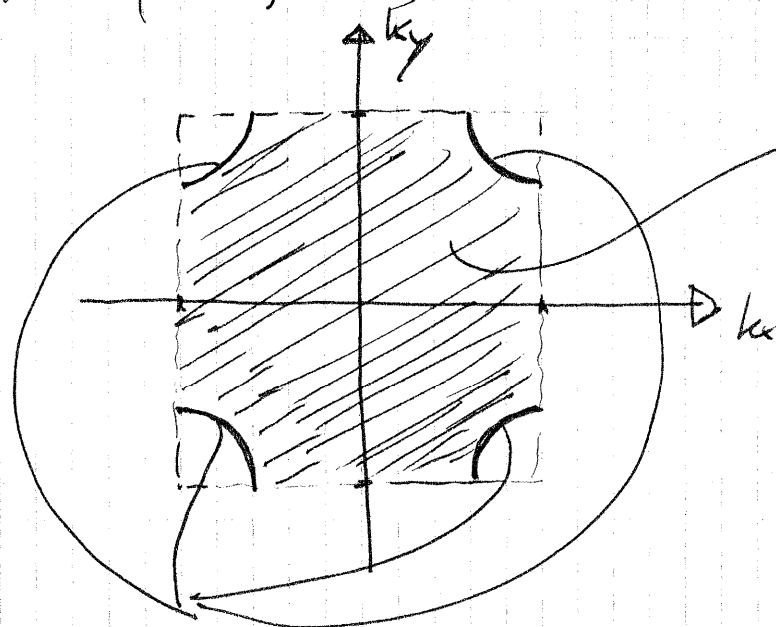
vi har maksimumvirkte cos-funksjoner rundt disse punktene, og vi får:

$$E_{k_c} = \underbrace{\phi(\phi - \phi')} - \phi a^2 k_c^2$$



Fermi-niveauet blir da tilnærmet sirkulært rundt punktene

$$k_c = \left(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a} \right)$$



Fylt Fermi-sjø av elektron-tilstander.

Fermi-nivå

(11)

Lesj merke til at ettersom vi fyller opp elektron-tilstandene i Brillouin-sonen for neste tomte bånd til neste fullt bånd, endre topologien til Fermi-nivået seg! Ved neste tomte bånd er Fermi-nivået en lukket lukket kurve. Ved neste fullt bånd er Fermi-nivået 4 separate bølger i k -rommet.

Ben utest til venstre og mot høyre til sirkulære i 4. kvadrant, osv.

Vi ser at topologien endrer seg i det Fermi-nivået for bølger punktene $\vec{k} = (\pm \frac{\pi}{a_1}, 0)$ og $\vec{k} = (0, \pm \frac{\pi}{a_2})$

$$\text{Da er } \underline{E_{ho} = -4t'}$$

Midten av båndet er gitt ved

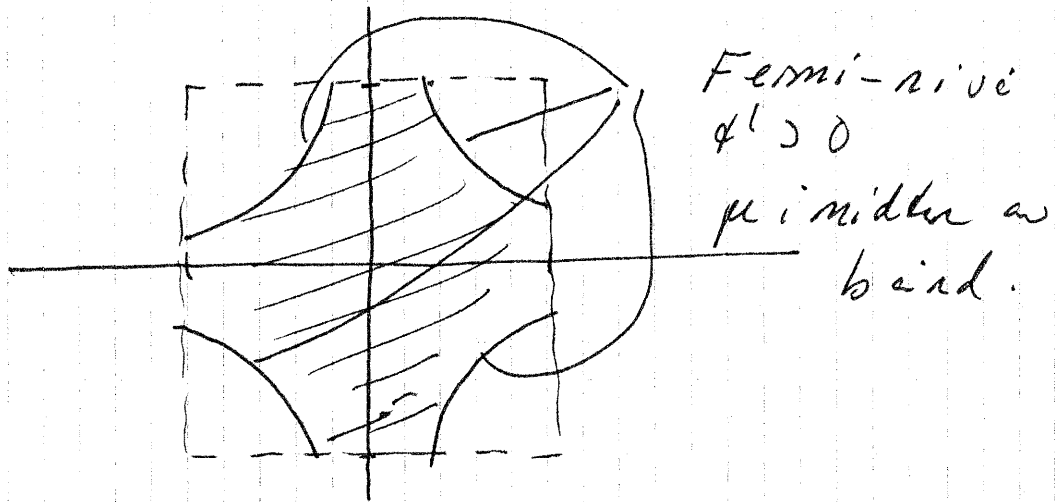
$$\underline{E_{ho}^{max} + E_{ho}^{min} = 0} > -4t'$$

2

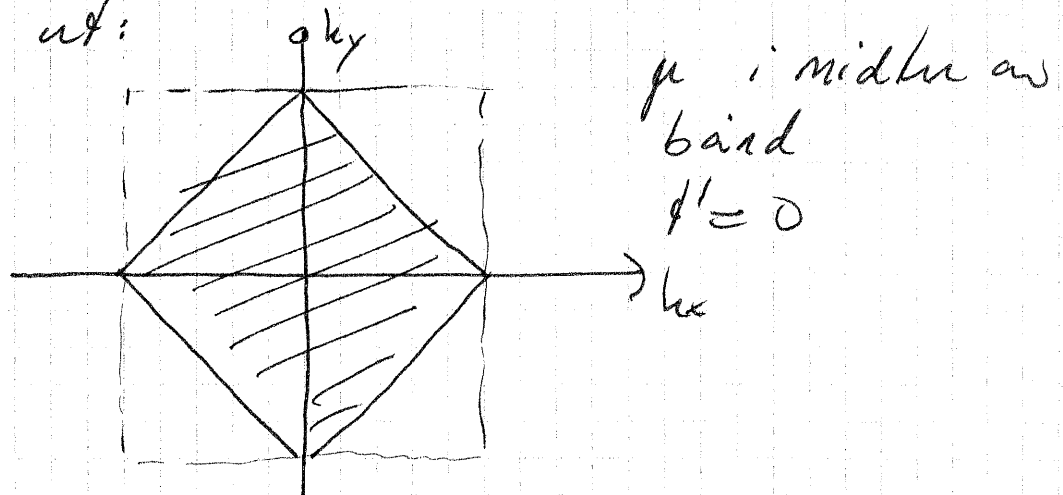
Det betyr at Fermi-nivået, når μ er i midten av båndet, må ha en åpen struktur, delt i 4 deler, og derfor ikke er lukket kurve.

Det ser altså slik ut!

(12)



Et spesielt tilfelle får ved $\phi' = 0$, for da vil midten av båndet sammenfalle med den verdien μ som markerer skillet mellom ledet og åpen struktur μ i Fermi-nivået, som derfor ser slik ut:



e) Vi må legge til leddet

(13)

$$- \hbar \cdot \sum_i \vec{S}_i$$

$$= - \hbar \sum_i S_{iz}$$

$$= - \hbar \sum_{i \neq p} \sigma_{3 \alpha \beta} C_{i \alpha}^{\dagger} C_{i \beta}$$

$$= - \hbar \sum_i \underbrace{\sigma}_{\sigma = \pm 1} C_{i \sigma}^{\dagger} C_{i \sigma} \quad \text{q.e.d.}$$

siden

$$\sigma_{\alpha \beta} = \pm \delta_{\alpha \beta}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Med Fourier-transformerte operetore
finnes vi:

$$- \hbar \sum_{\sigma \hbar} \sigma C_{\sigma}^{\dagger} C_{\sigma}$$

slike et vi får for H :

$$H = \sum_{\vec{k} \sigma} \left[-2t \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \right. \\ \left. + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a) \right. \\ \left. - \mu - \sigma \hbar \right] C_{\vec{k} \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k} \sigma}$$

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} (E_{k\sigma} - \mu) C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

$$E_{k\sigma} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \\ + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a) \\ - \mu \sigma \quad ; \quad \sigma = \pm 1$$

Vi ser at magnet-feltet opphever spin-degenerasjonen av energi-båndet, slik et spin som peker i samme retning som det ytre magnetfeltet får mindre energi enn det som peker i motsatt retning.