Øving 10, TFY4210 Anvendt Kvantemekanikk, Vår 2006

Oppgave 1
Vi ser igjen 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:

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

Her er $(c_{i,\sigma}^{\dagger}, c_{i,\sigma})$ 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.
Ved å innføre de Fourier-transformerte operatorene

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

der N er antall gitterpunkt på det kvadratiske gitteret, kan det vises at Hamilton-operatoren kan skrives på formen (se Øving 9)

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

a) Beregn tetthet av tilstander

$$D(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma}),$$

for dette systemet når $t^{'} = 0$, og vis at det finne en logaritmisk van-Hove singularitet i $D(\omega)$.
b) Beregn fri energi

$$F = -\frac{\ln Z}{\beta},$$

og indre energi

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

til dette elektron-systemet. Her er $\beta = 1/k_B T$ i standard notasjon for statistisk mekanikk.
c) Finn eksplisitt temperatur-avhengigheten til varmekapasiteten

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T},$$

ved lave temperaturer.