Løsningsforslag til Øving 10, TFY 4210 ①

Oppgave 1

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

$$= \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \delta\left[\omega + 2t\,(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))\right]$$

$$= \frac{1}{N}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_x}{\frac{2\pi}{\sqrt{N}a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_y}{\frac{2\pi}{\sqrt{N}a}}\, \delta(\omega + 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)))$$

$$= \frac{a^2}{4\pi^2}\cdot 4\int_0^{\frac{\pi}{a}} dk_x \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk_y\, \delta\left[\omega + 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))\right]$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 t}\int_0^{\pi} dx \int_0^{\pi} dy\, \delta\left(\frac{\omega}{2t} + \cos x + \cos y\right)$$

Vi utfører først x-integrasjonen.

$$u = \cos x\ ; \quad x = \cos^{-1}(u)\ ; \quad dx = -\frac{du}{\sqrt{1-u^2}}$$

$\Rightarrow$

$$-\frac{1}{2\pi^2 t}\int_1^{-1} \frac{du}{\sqrt{1-u^2}} \int_0^{\pi} dy\, \delta\left(\frac{\omega}{2t} + \cos y + u\right)$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 t}\int_{-1}^{1} \frac{du}{\sqrt{1-u^2}} \int_0^{\pi} dy\, \delta\left(\frac{\omega}{2t} + \cos y + u\right)$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 t}\int_0^{\pi} dy\, \frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{\omega}{2t} + \cos y\right)^2}}$$

Innfør $\cos y = v$

$$\varepsilon = \frac{\omega}{2t}$$

$$D(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 t} \int_{-1}^{1} \frac{dv}{\sqrt{1-v^2}} \frac{1}{\sqrt{1-(\varepsilon+v)^2}}$$

La først $\omega > 0$ ɔ: $\varepsilon > 0$

(Integralet er symmetrisk, ~~Det s~~ mht $\omega = 0$. Det ser vi slik:

$$D(-\omega) = \frac{1}{2\pi^2 t} \int_{-1}^{1} \frac{dv}{\sqrt{1-v^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-(-\varepsilon+v)^2}}$$

$$= \frac{-1}{2\pi^2 t} \int_{+1}^{-1} \frac{dv}{\sqrt{1-v^2}} \frac{1}{\sqrt{1-(-\varepsilon-v)^2}}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 t} \int_{-1}^{1} \frac{dv}{\sqrt{1-v^2}} \frac{1}{\sqrt{1-(\varepsilon+v)^2}} = D(\omega)$$
)

$$D(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 t} \int_{-1}^{1} \frac{dv}{\sqrt{(1-v)(1+v)(1-\varepsilon-v)(1+\varepsilon+v)}}$$

Men vi må også ta hensyn til at argumentet i $\delta(1+\varepsilon+v)$ må passere igjennom null for å få bidrag ɔ: siden $|\cos y| < 1$ må vi ha $\left|\frac{\omega}{2t} + v\right| < 1$

$$-1 < \varepsilon + \nu < 1$$

$$\nu < 1 - \varepsilon$$

$$\nu > -1 - \varepsilon$$

$$\nu \in [\mathrm{Max}(-1, -1-\varepsilon), \mathrm{Min}(1, 1-\varepsilon)]$$

Integralet er velkjent og tabulert.
Se for eksempel Gradshteyn + Ryzhik, 3.147, #4 (s.242). Det kan også utføres med Maple/Mathematica.

$$D(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 t} K\left(\sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{4t}\right)^2}\right).$$

Vi ser eksplisitt at $D(\omega) = D(-\omega)$.
der $K(x)$ er et elliptisk integral.

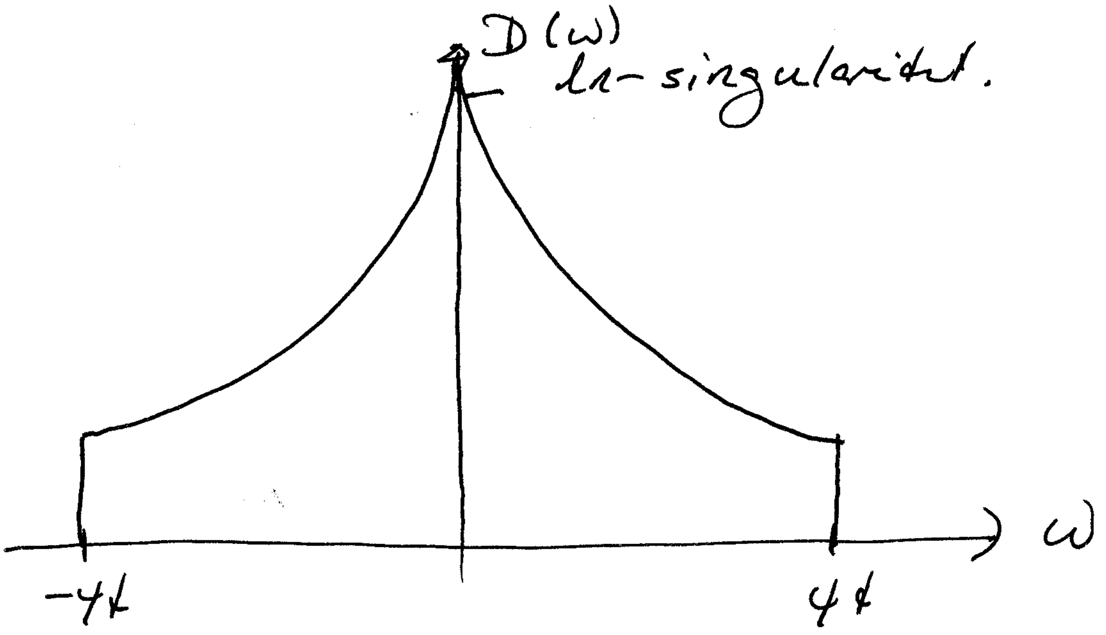
Innfør $q = \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{4t}\right)^2}$

$$q' = \sqrt{1 - q^2} = \frac{|\omega|}{4t}$$

Små ω ⟹ q nær 1:

$$K(q) \simeq \ln\left(\frac{4}{q'}\right) = \ln\left(\frac{16t}{\omega}\right)$$

Altså ser vi at for ω nær 0 ⟹ midt i båndet, har $D(\omega)$ en logaritmisk singularitet.



b) $$H=\sum_{\vec{k},\sigma}(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)n_{k\sigma}$$ Samme form som fri elektron gass.

$$n_{k\sigma}=0,1$$

Da vet vi fra statistisk mekanikk at

$$Z=\prod_{\sigma=\pm 1}\prod_{k}\left[1+e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}\right]$$

$$F=-\frac{1}{\beta}\sum_{\sigma}\sum_{\vec{k}}\ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}\right)$$

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

$$=-\sum_{\sigma}\sum_{\vec{k}}\left[-(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)\right]\frac{e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}}$$

$$U = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}{1 + e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}}$$

Innfør Fermi-Dirac fordelingen

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{\beta x}}$$

$$U = \sum_{\vec{k},\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu)\, f(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)$$

c) Varmekapasiteten:

Temperatur-avhengigheten skriver seg fra Fermi-fordelingen under $\vec{k}$-summen.

$$\frac{\partial}{\partial T} f(x) = \frac{\partial}{\partial \beta} f(x) \frac{\partial \beta}{\partial T}$$

$$= -\frac{1}{k_B T^2} \frac{(-1)(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)\, e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}}{\left(1 + e^{\beta(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}\right)^2}$$

$$= \frac{1}{k_B T^2} \frac{(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}{\cosh^2\left(\frac{\beta(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)}{2}\right)}$$

$$C_V = \frac{1}{k_B T^2} \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)^2}{\cosh^2\left(\frac{\beta}{2}(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)\right)}$$

$$= \frac{\overset{\text{spinn-sum}}{2}}{k_B T^2} \int_{-\infty}^{\infty} D(\varepsilon) \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{\cosh^2\left(\frac{\beta(\varepsilon-\mu)}{2}\right)} d\varepsilon$$

Ved lave T (store β) kan $\cosh^2\left(\frac{\beta(\varepsilon-\mu)}{2}\right)$ store overalt unntatt ved $\varepsilon-\mu$. Det betyr at mesteparten av integralet kommer fra området $\varepsilon \simeq \mu$. Dermed:

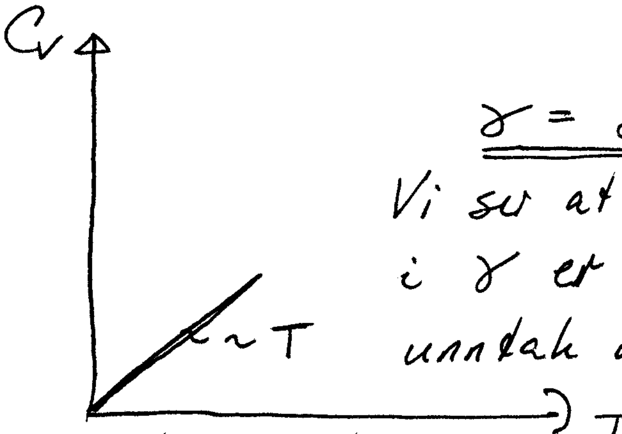
$$C_V \cong \frac{2}{k_B T^2} D(\mu) \cdot 2 \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon^2}{\cosh^2\left(\frac{\beta\varepsilon}{2}\right)}$$

Innfør $x = \frac{\beta\varepsilon}{2} \Rightarrow \beta$

$$\varepsilon = \frac{2}{\beta} x$$

$$C_V = \frac{4}{k_B T^2} \underbrace{D(\mu)}_{\text{Tetthet av tilstander på Fermi-nivå.}} \cdot \frac{8}{\beta^3} \underbrace{\int_0^\infty dx \, \frac{x^2}{\cosh^2 x}}_{K = \frac{\pi^2}{12}}$$

$$= 32 K k_B^2 T D(\mu) = \underline{\underline{\gamma T}}$$



$$\underline{\underline{\gamma = 32 K k_B^2 D(\mu)}}$$

Vi ser at faktorene som inngår i γ er <u>universelle</u>, med unntak av $D(\mu)$, som er modell (material) avhengig. C_V øker når tettheten av tilstander på Fermi-nivå øker, naturlig nok.

Noen kommentarer til F og U ved $T \to 0$:

$$F = U - TS \to U \quad \text{når } T \to 0$$

$$\lim_{T \to 0} U = E_0 = \text{grunntilstands-energien}$$

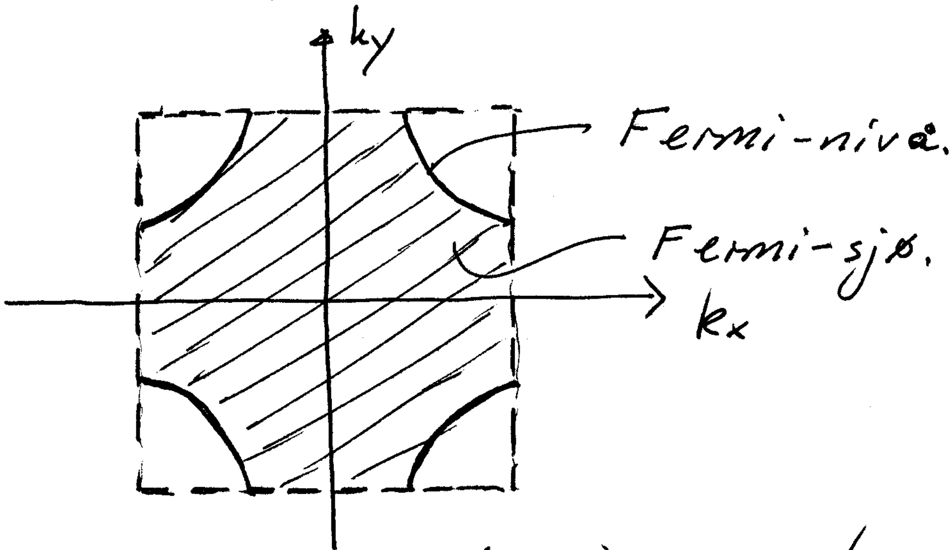
$$U = \sum_{\vec{k},\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) \, f(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)$$

$$\lim_{T \to 0} f(\varepsilon_{k\sigma} - \mu) = \underbrace{\Theta(\mu - \varepsilon_{k\sigma})}_{\text{Heaviside step-function}}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1\,; & x > 0 \\ 0\,; & x < 0 \\ \frac{1}{2}\,; & x = 0 \end{cases}$$

$\Rightarrow$

$$U(T=0) = \sum_{\vec{k},\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu)\, \theta(\mu - \varepsilon_{k\sigma})$$



Tolkningen av $U(T=0)$ er at det summeres over én-partikkel tilstander $(\vec{k},\sigma)$ med energi $\varepsilon_{k\sigma} - \mu$, slik at bare tilstandene som ligger inne i Fermi-sjøen (skravert område).

$U(T=0) = E_0$ er altså summen av én-partikkel energier i besatte tilstander opp til tilstand med maximal energi, ɔ: Fermi-nivået.

La oss også se på fri energi F, for å se om dette stemmer med $F = U - TS \overset{T=0}{=} U(T=0) = E_0$.

$$F = -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k},\sigma} \ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}\right)$$

$\beta \to \infty$ $\quad \varepsilon_{k\sigma} - \mu > 0 \Rightarrow$

$$1 + e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)} \to 1 \Rightarrow$$

$$\ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}\right) \to 0$$

Altså, når $T \to 0$ får vi <u>ingen</u> <u>bidrag</u> fra tilstander $(\vec{k},\sigma)$ <u>utenfor</u> Fermi-sjøen.

Se på bidragene, som er slik at $\varepsilon_{k\sigma} - \mu < 0$ (<u>inne</u> i Fermi-sjøen).

Da er $(\beta \to \infty)$

$$1 + e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)} \simeq e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}$$

$$\ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}\right) \simeq \ln\left(e^{-\beta(\varepsilon_{k\sigma}-\mu)}\right)$$

$$= -\beta(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)$$

$$F = \left(-\frac{1}{\beta}\right)(-\beta) \sum_{\vec{k},\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu)\, \Theta(\mu - \varepsilon_{k\sigma})$$

$$= \sum_{\vec{k},\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu)\, \Theta(\mu - \varepsilon_{k\sigma}) = U(T=0)$$

$$= \underline{\underline{E_0}}$$