

Theorie der Kondensierten Materie I

Notiztitel

03.02.2011

Zustandsdichte des Quadratgitters ($d=2$)

Mithilfe der Formel 6.672.2 aus Gradstein+Kryshik

können wir ν durch die Legendre-Funktion $P_{-\frac{1}{2}}(x)$ ausdrücken:

$$\begin{aligned}\nu(\epsilon) &= \frac{1}{2\pi t a^2} \int_0^{\infty} dx [J_0(x)]^2 \cos\left(\frac{\epsilon}{2t} x\right) \\ &= \frac{1}{4\pi t a^2} P_{-\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}\left(\frac{\epsilon}{2t}\right)^2 - 1\right) \Theta(4t - |\epsilon|)\end{aligned}$$

Mit Abramowitz+Stegun, Formel 8.13.8:

$$P_{-\frac{1}{2}}(x) = \frac{2}{\pi} K\left(\sqrt{\frac{1-x}{2}}\right) \quad (|x| < 1)$$

erhalten wir eine Verbindung auch zum vollständigen elliptischen Integral der 1. Art $K(k)$:

$$\nu(\epsilon) = \frac{1}{2t(\pi a)^2} K\left(\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{4t}\right)^2}\right) \Theta(4t - |\epsilon|)$$

Daher folgt mit

$$K(k) \sim \begin{cases} \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{1}{4} k^2 + \frac{9}{64} k^4 + \dots\right) & (k \downarrow 0) \\ \frac{1}{2} \ln\left(\frac{16}{1-k^2}\right) & (k \uparrow 1) \end{cases}$$

das asymptotische Verhalten

$$\nu(\epsilon) \sim \begin{cases} \frac{1}{4\pi t a^2} \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{|\epsilon|}{4t}\right)\right] & \left(\frac{|\epsilon|}{4t} \uparrow 1\right) \\ \frac{1}{2t(\pi a)^2} \ln\left(\frac{16t}{|\epsilon|}\right) & (|\epsilon| \downarrow 0) \end{cases}$$

Zustandsdichte des einfach-kubischen Gitters ($d=3$)

Hierfür lässt sich der allgemeine Ausdruck

$$\nu(\epsilon) = \frac{1}{2\pi t a^3} \int_0^\infty dx [\mathcal{J}_0(x)]^3 \cos\left(\frac{\epsilon}{2t} x\right)$$

nicht ohne weiteres vereinfachen. Allerdings ist eine Analyse an den Bandkanten möglich:

$$\nu(\epsilon) \sim \frac{\sqrt{6t - |\epsilon|} \Theta(6t - |\epsilon|)}{4\pi^2 t^{3/2} a^3} \quad (|\epsilon| \nearrow 6t)$$

sowie an den van-Hove-Singularitäten

$$\nu(\epsilon) \sim \nu(2t) - \frac{3\sqrt{|\epsilon| - 2t} \Theta(|\epsilon| - 2t)}{4\pi^2 a^3 t} \quad (|\epsilon| \searrow 2t)$$

Zustandsdichte im Limes $d \rightarrow \infty$

Zuletzt betrachten wir noch den Fall hoher Dimensionalität $d \rightarrow \infty$ (bzw. allgemeiner: hoher Koordinationszahl $Z \rightarrow \infty$), in dem die **Dynamische Molekularfeld-Theorie** für wechselwirkende Elektronen exakt wird.

Wir entwickeln für kleine x :

$$[\mathcal{J}_0(x)]^d = \exp[d \ln[\mathcal{J}_0(x)]] = \exp\left\{d \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\frac{1}{4}x^2)^n}{(n!)^2} \right]\right\}$$

$$= e^{d \ln[1 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{64}x^4 + \dots]} = e^{-d(\frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{64}x^4 + \dots)}$$

$$\uparrow \ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^3)$$

Mit der Definition $\bar{\nu}(\epsilon) \equiv a^d \nu(\epsilon)$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}\bar{\nu}(\epsilon) &= \frac{1}{4\pi t} \int_{-\infty}^{\infty} dx [\bar{\nu}_0(x)]^d e^{-it \frac{\epsilon}{2t} x} \\ &= \frac{1}{4\pi t} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i \frac{\epsilon}{2t} x - \frac{1}{4} dx^2 - \frac{1}{64} dx^4 - \dots}\end{aligned}$$

Jetzt substituieren wir $x \equiv \frac{2}{\sqrt{d}} y$ und reskalieren die Hüpfamplitude $t \equiv \frac{t^*}{\sqrt{2d}}$ ($= \frac{t^*}{\sqrt{2}}$). Es folgt für $d \rightarrow \infty$:

$$\bar{\nu}(\epsilon) = \frac{1}{\pi \sqrt{2} t^*} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-i\sqrt{2} \epsilon y / t^* - y^2 - y^4 / (4d) + \dots}$$

$\uparrow d \rightarrow \infty$
 $\rightarrow 0$

$$\sim \frac{1}{\pi \sqrt{2} t^*} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-(y + i \frac{\epsilon}{\sqrt{2} t^*})^2 - \frac{\epsilon^2}{24 t^{*2}}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi} t^*} e^{-\frac{1}{2} (\epsilon / t^*)^2} \quad (*)$$

Die Zustandsdichte erhält also die Form einer Gauss-Funktion mit den Eigenschaften

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \bar{\nu}(\epsilon) = 1, \quad \langle \epsilon \rangle = 0, \quad \sqrt{\langle \epsilon^2 \rangle} = t^*,$$

die auch in endlichen Dimensionen exakt erfüllt sind ($\langle \epsilon^2 \rangle = 2 t^2$). Speziell ist allerdings, dass für $d = \infty$ die Bandkanten im Unendlichen liegen.

* folgt auch aus dem Zentralen Grenzwertsatz.

Kontrollrechnung, in Vorlesung übersprungen:

Das Verhalten der Zustandsdichten an den Bandkanten lässt sich auch gut mit der Faltungformel herleiten. Wir entwickeln dazu zunächst die 1-d-Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} \bar{\nu}_1(\epsilon) &= \frac{1}{\pi} \left((2t)^2 - \epsilon^2 \right)^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\pi t} \left(1 - \left(\frac{\epsilon}{2t} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2\pi t} \left(\underbrace{\left(1 - \frac{\epsilon}{2t} \right)}_x \left(1 + \frac{\epsilon}{2t} \right) \right)^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\pi t} \left[x (2-x) \right]^{-\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2\pi t} \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{1}{\sqrt{2-x}} = \frac{1}{2\pi t} \frac{1}{\sqrt{x}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{x}{2\sqrt{2}^3} + \mathcal{O}(x^2) \right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}\pi t} \left(\frac{1}{\sqrt{x}} + \frac{\sqrt{x}}{4} \right) + \mathcal{O}(x^{3/2}) \quad (x = 1 - |\frac{\epsilon}{2t}|) \\ &\equiv \bar{\nu}_1^{(1)}(\epsilon) + \bar{\nu}_1^{(2)}(\epsilon) + \mathcal{O}(x^{3/2}) \end{aligned}$$

mit $\bar{\nu}_1^{(1)}(\epsilon) = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi t} \left(1 - |\frac{\epsilon}{2t}| \right)^{-\frac{1}{2}}$; $\bar{\nu}_1^{(2)}(\epsilon) = \frac{1}{8\sqrt{2}\pi t} \left(1 - |\frac{\epsilon}{2t}| \right)^{\frac{1}{2}}$

$$\bar{\nu}_2^{(1)}(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' \nu_1^{(1)}(\epsilon') \nu_1^{(1)}(\epsilon - \epsilon')$$

$$\Delta\epsilon \equiv 4t - |\epsilon|$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 t^2} \int_0^{\Delta\epsilon/2t} 2t dx' \frac{1}{\sqrt{x'}} \left(\frac{\Delta\epsilon}{2t} - x' \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 t} \int_0^{\sqrt{\Delta\epsilon/2t}} 2 dy \left(\frac{\Delta\epsilon}{2t} - y^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$\begin{aligned} y &= \sqrt{x'} \\ dy &= \frac{dx'}{2\sqrt{x'}} \end{aligned}$$

$$y = \sqrt{\frac{\Delta \epsilon}{2t}} \sin \varphi \rightarrow dy = \sqrt{\frac{\Delta \epsilon}{2t}} \cos \varphi d\varphi$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 t} \int_0^{\pi/2} \frac{\sqrt{\frac{\Delta \epsilon}{2t}} \cos(\varphi) d\varphi}{\sqrt{\frac{\Delta \epsilon}{2t}} \sqrt{1 - \sin^2(\varphi)}} = \frac{1}{4\pi t}$$

$$\nu_1^{(2)}(\epsilon) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' \nu_1^{(1)}(\epsilon') \nu_1^{(2)}(\epsilon - \epsilon')$$

$$= \frac{1}{16\pi^2 t^2} \int_0^{\Delta \epsilon / 2t} 2t dx' \frac{1}{\sqrt{x'}} \left(\frac{\Delta \epsilon}{2t} - x'\right)^{1/2}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 t} \int_0^{\sqrt{\epsilon/2t}} dy \left(\frac{\Delta \epsilon}{2t} - y^2\right)^{1/2}$$

$$y = \sqrt{\frac{\Delta \epsilon}{2t}} \tilde{y} \rightarrow dy = \sqrt{\frac{\Delta \epsilon}{2t}} d\tilde{y}$$

$$= \frac{\Delta \epsilon}{8\pi^2 t^2} \int_0^1 d\tilde{y} \sqrt{1 - \tilde{y}^2} = \frac{\pi}{4} \text{ (Fläche von } \frac{1}{4} \text{ Einheitskreis)}$$

$$= \frac{\Delta \epsilon}{32\pi t^2}$$

Dies stimmt offensichtlich mit der aus $K(h^2)$ gewonnenen Entwicklung überein.

Fermi-Fläche und Perfect Nesting

Im Zusammenhang mit Zustandsdichten haben wir bereits Flächen konstanter Energie eingeführt.

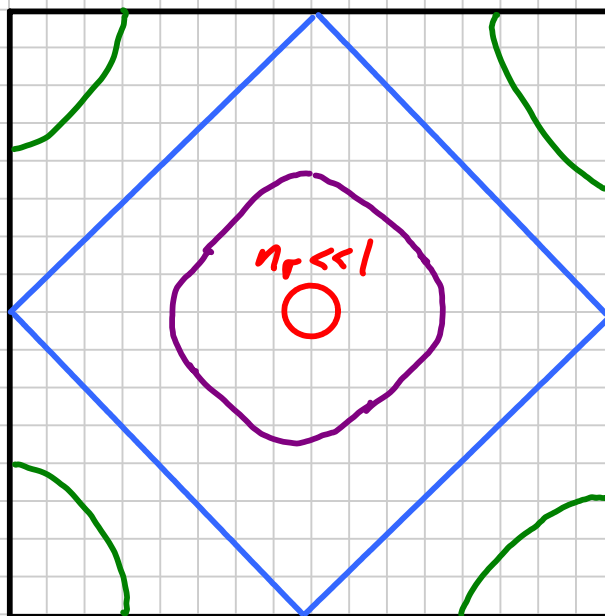
$$S(E) = \{ \vec{k} \mid \epsilon_n(\vec{k}) = E \}$$

Besonders wichtig ist die Fermi-Fläche $S(E_F)$, die für $T \rightarrow 0$ besetzte von unbesetzten Zuständen im k -Raum trennt.

Freier Fall: ohne Gitterpotential sind die Fermi-Flächen (Hyper-) Kugeln, wobei der Radius durch den Fermi-Wellenvektor k_F mit $\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = E_F$ gegeben ist.

Für Elektronen im Gitter gilt das nur noch im Grenzfall $n_f \ll 1$; i.A. ist die Struktur der FF kompliziert, insbesondere, wenn sie die Grenzen der BZ schneidet.

Beispiel: TB, $d=2$
(Quadratgitter):



halbe Füllang

Es ist kein Zufall, dass die Fermi-Fläche bei halber Füllung ($n_0 = \frac{1}{2}$) eine hohe Symmetrie aufweist: dies ist für alle Gitter mit Perfect Nesting der Fall.

Perfect Nesting: $\epsilon_n(\vec{k}) = -\epsilon_n\left(\frac{\pi}{a}\mathbb{1}_d - \vec{k}\right)$

Beispiel hypercubisches Gitter, TB:

$$\epsilon_n(\vec{k}) = -t_n \sum_{\alpha} \cos(k_{\alpha} a)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \epsilon_n\left(\frac{\pi}{a}\mathbb{1}_d - \vec{k}\right) &= -t_n \sum_{\alpha} \cos(\pi - k_{\alpha} a) \\ &= -t_n \sum_{\alpha} -\cos(k_{\alpha} a) = -\epsilon_n(\vec{k}) \end{aligned}$$

↑ bei Inversions-symmetrie auch positives Vorzeichen

Konsequenzen von Perfect Nesting:

1. Da jeder positiven Energie eine negative zugeordnet ist, ist die Zustandsdichte für das Band n symmetrisch: $\nu_n(\epsilon) = \nu_n(-\epsilon)$
2. Für das halbgefüllte Band liegt das chemische Potential bei allen Temperaturen mittig: $\mu(T) = \epsilon_F = 0$.
3. Dann ist die Fermi-Fläche invariant unter einer Verschiebung $\vec{k} \rightarrow \frac{\pi}{a}\mathbb{1}_d - \vec{k}$, was zu Instabilitäten führt: Antiferromagnetismus, Ladungsdichtewelle...