Theorie der Kondensierten Materie I WS 2018/19

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny, M.Sc. T. Lüdwig

Blatt 4
Lösungsvorschlag

---

1. Landauscher Diamagnetismus:

(a) *Leiten Sie eine Gleichung für die Funktion $\chi(y)$ her.*

Die Schrödinger Gleichung

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eB}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right]\psi = E\psi.$$

Mit dem Ansatz finden wir

$$\chi'' + 2m\left[\left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right) - \frac{m}{2}\omega_B^2(y-y_0)^2\right]\chi = 0.$$

Die Eigenfrequenz:

$$\omega_B = \frac{|e|B}{mc} = 2\mu_B B.$$

Das Zentrum der Schwingung:

$$y_0 = -c\frac{p_x}{eB}.$$

(b) *die Eigenenergien*

Energieniveaus des Oszillators:

$$E' = \omega_B\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Die Landau-Niveaus:

$$E = \omega_B\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m}.$$

(c) *Der Entartungsgrad*

Die Entartung: die Landau-Niveaus sind unabhängig von p_x!
Der Mittelpunkt y_0 muss innerhalb von der Fläche L_xL_y liegen:

$$0 \leqslant y_0 \leqslant L_y.$$

Deswegen, die p_x-Werte gehören zu einem begrenzten Interval

$$\Delta p_x = \frac{eB}{c} L_y.$$

Die Zahl der möglichen Werte im Interval Δp_x ist

$$\mathcal{N}_{p_x} = \frac{L_x}{2\pi} \Delta p_x.$$

Deswegen der Entartungsgrad der Landau-Niveaus ist

$$\mathcal{N} = \frac{eBS}{2\pi c}, \quad S = L_x L_y.$$

(d) *Das großkanonische Potential*

Die großkanonische Zustandssumme ist (siehe Vorlesung)

$$Z_G = \sum_{\{n_\alpha\}} e^{-\sum_\alpha n_\alpha (E_\alpha - \mu)/T} = \prod_\alpha \left(1 + e^{-(E_\alpha - \mu)/T}\right) = \prod_{\sigma = \pm\frac{1}{2}} \prod_{n=0}^{\infty} \prod_{p_x, p_z} \left[1 + e^{\left(\mu - \omega_B \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{p_z^2}{2m}\right)/T}\right]$$

Das großkanonische Potential $\Omega = -T \ln Z_G$ ist dann

$$\begin{aligned}
\Omega = -T \sum_\alpha \ln\left(1 + e^{-\beta(E_\alpha - \mu)}\right) &= -2T \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p_x, p_z} \ln\left[1 + e^{\left(\mu - \omega_B \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{p_z^2}{2m}\right)/T}\right] \\
&= -2T \frac{|e| L_x L_y B}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{L_z dp_z}{2\pi} \ln\left[1 + e^{\left(\mu - \omega_B \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{p_z^2}{2m}\right)/T}\right] \\
&= -\frac{2TV|e|B}{(2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln\left[1 + e^{\left(\mu - \omega_B (n + \frac{1}{2})\right)/T} e^{-p_z^2/(2mT)}\right].
\end{aligned}$$

(e) *Vereinfachung des großkanonischen Potentials*

Wir schreiben das großkanonische Potential als

$$\Omega = 2\mu_B B \sum_{n=0}^{\infty} f(\mu_n) \qquad \text{mit} \qquad \mu_n = \mu - \mu_B B\,(2n + 1)$$

und

$$f(\mu_n) = -\frac{TmV}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln\left(1 + \exp\left[\frac{1}{T}\left(\mu_n - \frac{p_z^2}{2m}\right)\right]\right).$$

(f) *Berechnung des großkanonischen Potentials*

Um die Summe über n auszuwerten verwenden wir die folgende Form der Euler-Maclaurin-Näherungsformel für Summen [1]

$$\sum_{n=0}^{\infty} F\left(n+\frac{1}{2}\right) \approx \int_0^{\infty} dx F(x) + \frac{1}{24}F'(0),$$

die wir im Fall kleiner Felder $\mu_B B \ll T$ verwenden dürfen. Wir setzen

$$F\left(n+\frac{1}{2}\right) = f\left(\mu - 2\mu_B B\left(n+\frac{1}{2}\right)\right),$$

in der obegen Gleichung ein und verwenden ($n + \frac{1}{2} \to x$)

$$\left.\frac{\partial f(\mu - 2\mu_B Bx)}{\partial x}\right|_{x=0} = -2\mu_B B \frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu}$$

Damit erhalten wir

$$\Omega = \Omega_0(\mu) - \frac{(2\mu_B B)^2}{24}\frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu}$$

wobei

$$\Omega_0(\mu) = 2\mu_B B \int_0^{\infty} dx f(\mu - 2\mu_B Bx) \overset{y=\mu-2\mu_B Bx}{=} -\int_{\mu}^{-\infty} dy\, f(y) = \int_{-\infty}^{\mu} dy\, f(y).$$

Dieser Ausdruck hängt nicht vom Magnetfeld B ab und trägt deshalb auch nicht zur Suszeptibilität bei. Ω_0 ist gerade das großkanonische Potential für $B = 0$. Daran sieht man, dass wir gerade eine Entwicklung in kleinen Feldern erhalten haben. Für die Ableitung gilt $\partial\Omega_0(\mu)/\partial\mu = f(\mu)$. Wenn das Magnetfeld und die Variation von f bzw. Ω mit μ nicht groß sind, dann gilt

$$\frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu} = \frac{\partial^2 \Omega_0(\mu)}{\partial \mu^2} \approx \frac{\partial^2 \Omega(\mu, B)}{\partial \mu^2}.$$

Wenn wir das und Ω_0 in Ω einsetzen, erhalten wir den gesuchten Ausdruck

$$\Omega = \Omega_0(\mu) - \frac{1}{6}(\mu_B B)^2 \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2}.$$

(g) *Suszeptibilität*

Die Suszeptibilität ist

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2}.$$

[1] Die hier verwendete und die auf dem Übungsblatt angegebene Form (für $a = 0$) der Euler-Maclaurin-Formel sind äquivalent. Man kann auch die auf dem Übungsblatt angegebene Form verwenden, allerdings muss man dann zusätzlich entweder in kleinen Feldern $\mu_B B \ll T$ entwickeln, oder die Formel oben daraus herleiten. Eine Herleitung der beiden Euler-Maclaurin-Formeln ist im Anhang.

Wir haben in dieser Aufgabe bisher nur den Beitrag zum großen Potential betrachtet, der mit der Bahnbewegung der Elektronen zusammenhängt. Die daraus folgende Landau-Suszeptibilität ist (wir vernachlässigen die B-Abhängigkeit von $\partial^2\Omega/\partial B^2$)

$$\chi_L = \frac{\mu_B^2}{3}\frac{\partial^2\Omega}{\partial\mu^2} = -\frac{\mu_B^2}{3}\left(\frac{\partial N}{\partial\mu}\right)_{T,V}$$

Hier haben wir noch die Beziehung $N = -\left(\partial\Omega/\partial\mu\right)_{T,V}$ eingesetzt, die wir für den Vergleich mit der Pauli-Suszeptibilität brauchen. Die Pauli-Suszeptibilität χ_P, die durch den Spin der Elektronen generiert wird, und die Landau-Suszeptibilität hängen also wie folgt zusammen

$$\chi_P = \mu_B^2\left(\frac{\partial N}{\partial\mu}\right)_{T,V} = -3\chi_L.$$

Die Summe der beiden Beiträge ist

$$\chi = \chi_L + \chi_P = \frac{2}{3}\chi_P.$$

Die Pauli-Suszeptibilität ist positiv, weil das System Energie gewinnt wenn sich die Spins der Elektronen in Richtung des Magnetfelds ausrichten (Pauli-Paramagnetismus). Der Landau-Beitrag ist also negativ (Landau-Diamagnetismus). Da der Pauli-Beitrag beim freien Fermigas größer ist als der diamagnetische Landau-Beitrag ist die Gesamtsuszeptiblität positiv, das Gas also paramagnetisch.

In Metallen werden die Beiträge z.B. durch das Kristallgitter beeinflusst, es kommt vor, dass χ_L größer wird als χ_P, das Metall ist dann diamagnetisch. Bei starken Magnetfeldern ($\mu_B B \sim \epsilon_F$) gibt es zusätzliche, oszillierende Beiträge zur Suszeptibilität, die für den De-Haas-van-Alphen-Effekt verantwortlich sind.

2. Landau-Niveaus in Graphen:

Das Vektorpotential in Landau-Eichung ist

$$\boldsymbol{A} = -yB\boldsymbol{e}_x.$$

Wir führen im Folgenden die magnetische Länge ℓ_B, gemäß $\ell_B^2 = 1/|e|B$ ein. Damit können wir den Hamiltonoperator schreiben als

$$H = v_F\begin{pmatrix} 0 & \Pi \\ \Pi^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$

wobei

$$\Pi = p_x - ip_y - y\ell_B^{-2}, \qquad \Pi^\dagger = p_x + ip_y - y\ell_B^{-2}, \qquad \left[\Pi, \Pi^\dagger\right] = 2\ell_B^{-2}.$$

Jetzt führen wir die Operatoren ein

$$a = \ell_B\Pi/\sqrt{2}, \qquad a^\dagger = \ell_B\Pi^\dagger/\sqrt{2},$$

die die Vertauschungsrelationen der Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren des harmonischen Oszillators erfüllen. Mithilfe dieser Operatoren können wir den Hamiltonoperator als

$$H = \omega_c \begin{pmatrix} 0 & a \\ a^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \qquad \omega_c = \sqrt{2} v_F / \ell_B,$$

umschreiben.

Die Eigenzustände dieses Hamiltonoperators können demnach mit Hilfe der Eigenzustände des harmonischen Oscillators beschrieben werden. Die Eigenzustände

$$|\Psi_{\lambda,n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |\phi_{n-1}\rangle \\ \lambda\, |\phi_n\rangle \end{pmatrix},$$

haben die Energien

$$\epsilon_{\lambda,n} = \lambda \omega_c \sqrt{n}, \qquad \lambda = \pm 1, \qquad n = 1, 2, 3, ...$$

Zusätzlich finden wir einen Zustand

$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |\phi_0\rangle \end{pmatrix},$$

mit der Energie $\epsilon_0 = 0$.

Der Dirac-Punkt K' ist mit dem Punkt K durch die Zeitumkehrtransformation verknüpft. Daher sehen wir sofort, dass für K':

$$H_{K'} = \omega_c \begin{pmatrix} 0 & a^\dagger \\ a & 0 \end{pmatrix},$$

und somit

$$|\Psi_{\lambda,n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |\phi_n\rangle \\ \lambda\, |\phi_{n-1}\rangle \end{pmatrix}, \qquad \epsilon_{\lambda,n} = \lambda \omega_c \sqrt{n},$$
$$|\Psi_0\rangle = \begin{pmatrix} |\phi_0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \epsilon_0 = 0.$$

Der Impuls p_x kommutiert mit dem Hamiltonoperator. Somit ergibt sich die übliche Entartung der Landau-Niveaus bezüglich des Impulses in x-Richtung,

$$\mathcal{N} = \frac{L^2}{2\pi \ell_B^2}.$$