

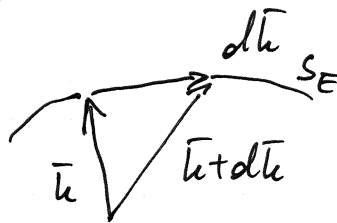
Gęstość stanów (DOS)

Wektor prędkości $\underline{v}_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k$ jest wektorem normalnym (prostopadłym) do powierzchni izoenergetycznej w przestrzeni odwrotnej S_E dla której $E_k = E = \text{const}$

D-d: Jeśli $d\bar{k}$ jest wektorem stycznym do powierzchni izoenergetycznej to zmiana energii

$$E_{\underline{k}+d\underline{k}} - E_{\underline{k}} = 0$$

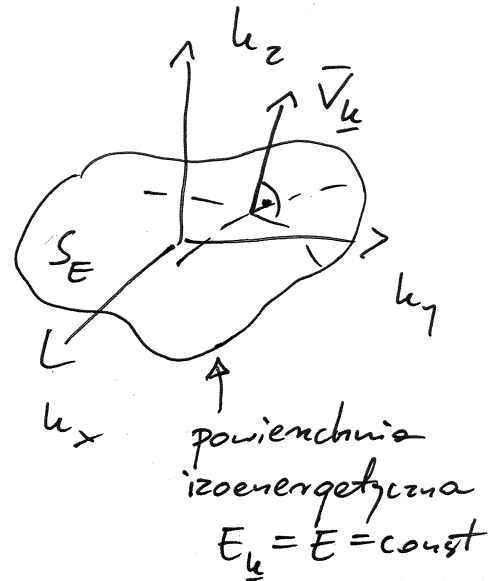
Jednocześnie



$$\begin{aligned} E_{\underline{k}+d\underline{k}} - E_{\underline{k}} &= E_{\underline{k}} + \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} \cdot d\bar{k} - E_{\underline{k}} = \\ &= \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} \cdot d\bar{k} \end{aligned}$$

$$\text{tzn.} \quad \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} \cdot d\bar{k} = 0$$

czyli $\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}$ jest ortogonalny do $d\bar{k}$, a więc jest normalny do powierzchni S_E w punkcie $\bar{k}$.



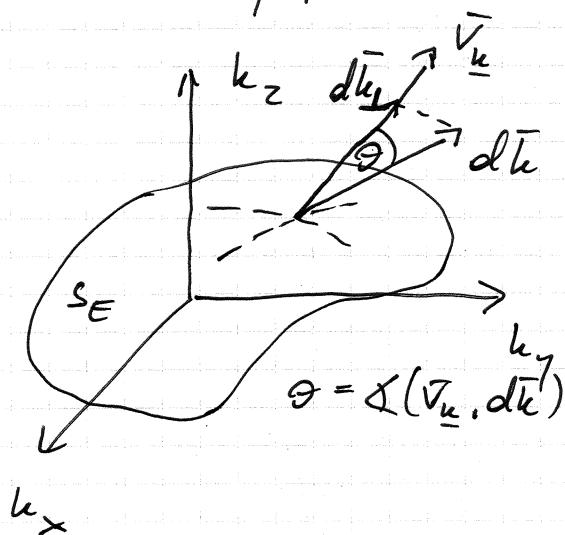
Taki wektor normalny do powierzchni izoenergetycznej wektor $\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}$ określa kierunek w pni odwrotnej, w którym następuje zmiana energii $E_{\underline{k}}$ tzn. jeśli rozważymy dodatnią zmianę energii (wartości bezwzględna) to możemy ją zapisać dla dowolnego przesunięcia w pni odwrotnej $d\bar{k}$

$$dE = |dE_{\underline{k}}| = |E_{\underline{k}+d\underline{k}} - E_{\underline{k}}| = |(\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}) \cdot d\bar{k}| =$$

$$= |\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}| d\underline{k} |\cos(\angle(\nabla_{\underline{k}}, d\underline{k}))| = |\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}| dk_{\perp}$$

gdzie $dk_{\perp}$ jest długością (wartością bezwzględną) wektora $d\underline{k}_{\perp}$ normalnego do powierzchni S_E tzn. wektora, który jest rzutem $d\underline{k}$ na $\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}$.

Dla każdego punktu powierzchni S_E możemy zdefiniować lokalny prawoskrętny układ współrzędnych kartezjańskich (dk'_x, dk'_y, dk'_z) : (ortogonalny układ współrzędnych)



$$d\underline{k} = (dk_x, dk_y, dk_z) =$$

$$= \underset{\substack{\uparrow \\ \text{wektor} \\ \text{styczny} \\ \text{do } S_E}}{d\underline{k}_{||}} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{wektor} \\ \text{normalny} \\ \text{do } S_E}}{d\underline{k}_{\perp}} = (dk'_x, dk'_y, 0) + (0, 0, dk'_z), \quad dk'_z = dk_{\perp} = \frac{dE}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|}$$

taki, że $dk'_x = dk_x, dk'_y = dk_y, dk'_z = dk_z$ czyli nie zmieniający objętości elementarnej $dk_x dk_y dk_z = dk'_x dk'_y dk'_z$

tzn. jacobian tego przekształcenia jest równy jeden.

W takim razie objętość elementarna

$$dk_x dk_y dk_z = dk'_x dk'_y dk_{\perp} = dS_E \frac{dE}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|}$$

gdzie $dS_E = dk'_x dk'_y$ jest polem elementarnym powierzchni izoenergetycznej S_E , dk'_x i dk'_y są składowymi wektora $d\underline{k}_{||}$ stycznego do powierzchni S_E .

Całkowita liczba stanów w paśmie energetycznym E_k przy założeniu degeneracji spinowej w układzie d -wymiarowym jest dana wzorem

$$2N = 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} 1 = \frac{2V_d}{(2\pi)^d} \underbrace{\iiint_{\text{RBZ}} d^d \underline{k}}^d = \frac{2V_d}{(2\pi)^d} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \underbrace{\iint_{S_E} dS_E}_{S_E \uparrow} \frac{dE}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} =$$

$$= \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \frac{2V_d}{(2\pi)^d} \underbrace{\iint_{S_E} dS_E}_{S_E \uparrow} \frac{1}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|}$$

$\uparrow$ całka w kierunku normalnym do S_E
 $\uparrow$ całka po powierzchni izoenergetycznej S_E

gdzie $V_d = \begin{cases} V, & d=3 \\ S, & d=2 \\ L, & d=1 \end{cases}$, $E_{\min}, E_{\max}$ - odpowiednio minimalna i maksymalna energia elektronu w paśmie energetycznym E_k

Na przykład w układzie trójwymiarowym ($d=3$)

$$2N = 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} 1 = \frac{2V}{(2\pi)^3} \iiint_{\text{RBZ}} dk_x dk_y dk_z = \frac{2V}{(2\pi)^3} \iiint_{\text{RBZ}} \underbrace{dk'_x dk'_y}_{\text{całka po powierzchni } S_E} \underbrace{dk'_z}_{\text{całka w kierunku normalnym do } S_E} =$$

$$= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \iint_{S_E} dS_E \frac{dE}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} =$$

$$= \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \frac{2V}{(2\pi)^3} \iint_{S_E} \frac{dS_E}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} v(E) dE$$

gdzie zdefiniowaliśmy gęstość stanów (funkcję gęstości stanów)

$$V(E) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \iint_{\substack{S_E \\ (E=\text{const})}} \frac{dS_E}{|v_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|}$$

która określa liczbę stanów o energii E .

W zapisie ogólnym d -wymiarowym

$$V(E) = \frac{2V_d}{(2\pi)^d} \iint_{S_E}^{(d-1)} \frac{dS_E}{|v_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} \quad \xrightarrow{\text{volume}}$$

Zwykle będzie nas interesować liczba stanów w objętości jednostkowej, $V_d=1$, która jest określana przez gęstość stanów

$$V(E) = \frac{2}{(2\pi)^d} \iint_{E=\text{const}} \frac{dS_E}{|v_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|}$$

Równoważnie zamiast wektora falowego $\underline{k}$ możemy użyć kwazipędu $\bar{p} = \hbar \underline{k}$ tzn. zamiast układu współrzędnych (k_x, k_y, k_z)

zastosować układ współrzędnych $(p_x, p_y, p_z) = (\hbar k_x, \hbar k_y, \hbar k_z)$,

wtedy

$$V(E) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \iint_{E=\text{const}} \frac{dS_E}{|v_{\underline{p}} E_{\underline{k}}|} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \iint_{E=\text{const}} \frac{dS_E}{|\underline{v}_{\underline{p}}|}$$

→ W układzie jednowymiarowym gęstość stanów na jednostkę objętości jest po prostu $\left| \frac{dE_k}{dk} \right|$ czyli jednowymiarowego $|v_k E_k|$.

$$\begin{aligned}
 (\text{Całkowita liczba stanów}) &= 2 \sum_{k \in \text{RBZ}} 1 = \frac{2L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk = \\
 &= 2 \frac{2L}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{a}} dk = \frac{2L}{\pi} \int_{E(k=0)}^{E(k=\frac{\pi}{a})} \frac{dk}{dE_k} dE_k = \\
 &= \frac{2L}{\pi} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \left| \frac{dk}{dE_k} \right| dE_k = L \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{2}{\pi} \frac{1}{\left| \frac{dE_k}{dk} \right|} dE_k = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} v(E) dE
 \end{aligned}$$

$$v(E) = \frac{2}{\pi} \frac{L}{\left| \frac{dE_k}{dk} \right|_{E_k=E}} \quad \text{lub gęstość stanów na}$$

$$\text{jednostkę długości (objętości)} \quad v(E) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\left| \frac{dE_k}{dk} \right|_{E_k=E}}$$

gdzie $\bar{V}_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k = \nabla_p E_k$ jest prędkością elektronu w stanie k .

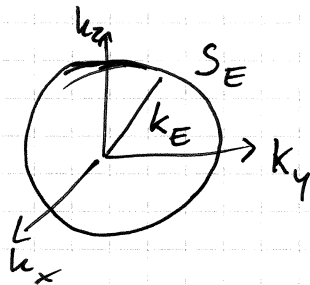
A. Gęstość stanów w układach izotropowych, czyli gdy $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

gdzie m^* jest masą efektywną, $m^* = \text{const} > 0$.

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad \nabla_k E_k = \frac{\hbar^2 \bar{k}}{m^*}, \quad V_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k = \frac{\hbar \bar{k}}{m^*}$$

Powierzenia izoenergetyczne:

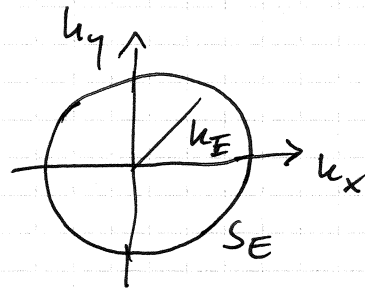
$d=3$ - sfera o promieniu $k_E = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ (współrzędne sferyczne)



$$dS_E = k_E^2 \sin \theta d\theta d\varphi$$

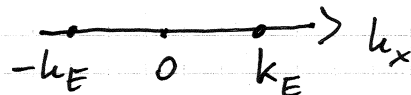
$d\Omega$, Ω - kąt bryłowy
($0 \leq \Omega < 4\pi$)

$d=2$ - okrąg o promieniu k_E
(współrzędne biegunowe)



$$dS_E = k_E d\varphi$$

$d=1$ - dwa punkty $\pm k_E$



$$dS_E = (\delta(k - k_E) + \delta(k + k_E)) dk$$

Gęstość stanów (na jednostkę objętości):

$$d=3: \nu(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \underbrace{\frac{k_E^2}{\frac{\hbar^2 k_E}{m^*}} \sin\theta d\theta d\varphi}_{d\Omega} = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{k_E m^*}{\hbar^2} (-\cos\theta) \Big|_0^{\pi} 2\pi =$$

$$= \frac{m^* k_E}{\pi^2 \hbar^2} = \frac{m^* \sqrt{2m^* E}}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{m^{*3/2}}{\hbar^3} E^{1/2} \sim \underline{E^{1/2}}$$

$$d=2: \nu(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \frac{k_E}{\frac{\hbar^2 k_E}{m^*}} d\varphi = \frac{4\pi}{4\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^2} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sim \underline{\text{const}}$$

$$d=1: \nu(E) = \frac{2}{2\pi} \int_{-k_E - \varepsilon}^{k_E + \varepsilon} (\delta(k - k_E) + \delta(k + k_E)) \frac{1}{\frac{\hbar^2 k_E}{m^*}} dk =$$

($\varepsilon \rightarrow 0$)

$$= \frac{2}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^2 k_E} = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\sqrt{m^*}}{\hbar} E^{-1/2} \sim \underline{E^{-1/2}}$$

Dla gazu swobodnych elektronów $m^* = m$ - masa elektronu.

Uwaga: Konstrukcja dS_E dla układu jednowymiarowego jest skomplikowana i niepotrzebna. Lepiej i łatwiej tę gęstość stanów można policzyć wprost z pochodnej, zgodnie z wcześniejszym komentarzem.

$$\nu(E) = \frac{2}{\pi} \left| \frac{dE_u}{dk} \right|_{E_u=E}^{-1} = \frac{2}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^2 k_E} = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{\sqrt{m^*}}{\hbar} E^{-1/2}$$

Gęstości stanów układów izotropowych możemy policzyć bez używania wzoru z gradientem E_k dokonując sumowania stanów i stosując biegunowy i sferyczny układ współrzędnych dla układów dwu- i trójwymiarowych tzn.

$$d=2: \quad \frac{1}{S} 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} 1 = \frac{2}{(2\pi)^2} \iint_{\text{RBZ}} d^2k = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{k_{\max}} k dk d\varphi =$$

$$= \frac{4\pi}{(2\pi)^2} \int_{E(0)}^{E(k_{\max})} k \frac{m^*}{\hbar^2 k} dE = \int_0^{E_{\max}} \frac{m^*}{\hbar^2} dE$$

czyli $\nu(E) = \frac{m^*}{\hbar^2}$

$$\left\{ \begin{array}{l} E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \\ dE = \frac{\hbar^2}{m^*} k dk \\ dk = \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m^* E}} dE \end{array} \right\}$$

$$d=3: \quad \frac{1}{V} 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} 1 = \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint_{\text{RBZ}} d^3k = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{k_{\max}} k^2 dk \sin\theta d\theta d\varphi =$$

$$= \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi \int_{E(0)}^{E(k_{\max})} \frac{2m^*}{\hbar^2} E \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m^* E}} dE =$$

$$= \int_0^{E_{\max}} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\hbar^3} E^{1/2} dE$$

czyli $\nu(E) = \frac{\sqrt{2}}{\hbar^2} \frac{m^{*3/2}}{\hbar^3} E^{1/2}$

Osobliwości funkcji $\frac{1}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|}$ nazywamy osobliwościami van Hove'a. Występują one dla tych wartości $E_{\underline{k}} = E$, dla których powierzchnie izoenergetyczne zawierają punkty, w których znika $\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}$. Pokażemy, że w RBZ są co najmniej trzy takie punkty w przypadku układu 1D, pięć takich punktów w przypadku układu 2D i siedem takich punktów w przypadku układu 3D.

Zauważmy, że w układzie jednowymiarowym

$$\nu(E) = \frac{2}{\pi} \left| \frac{dE_{\underline{k}}}{d\hbar} \right|^{-1}_{E_{\underline{k}}=E}$$

wtedy osobliwość van Hove'a oznacza zawsze osobliwość gęstości stanów.

Ogólnie, niezależnie od wymiaru przestrzeni

$$\nu(E) = \int_{E_{\underline{k}}=E} \frac{dS_E}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} \rightarrow \infty \text{ jeśli istnieje } \bar{\underline{k}}_0 \text{ takie, że } \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} = 0 \Big|_{\underline{k}=\bar{\underline{k}}_0}$$

oraz dla dowolnego $M > 0$, $\frac{1}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} > M$ w otoczeniu

$\bar{\underline{k}}_0$ o niezerowej miarze na powierzchni $E_{\underline{k}} = E$ tzn. takim, że $dS_E(|\underline{k} - \bar{\underline{k}}_0|) > 0$.

Takim przypadkiem są bieguny $(\pm\pi, 0)$, $(0, \pm\pi)$ dla dwuwymiarowej sieci kwadratowej z najbliższymi sąsiadami.

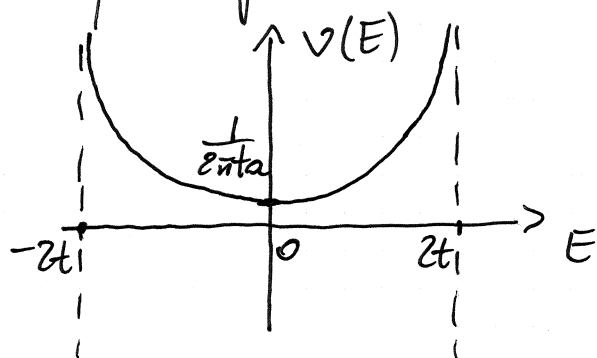
B. Gęstość stanów sieci kwadratowej ($d=1, 2, 3$) w przybliżeniu najbliższych sąsiadów.

$$\underline{d=1} : \quad \nu(E) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{2ta |\sin ka|} = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{2t \sqrt{1 - \cos^2 ka}} = \frac{1}{\pi a} ((2t)^2 - E^2)^{-\frac{1}{2}}$$

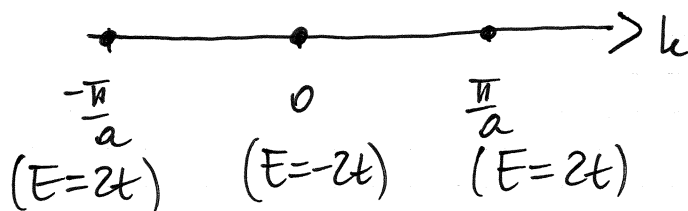
Osobliwości dla $E = \pm 2t$, czyli dla punktów w RBZ:

$$k=0 \quad (E=-2t), \quad k=\pm \frac{\pi}{a} \quad (E=2t).$$

Zauważmy, że obu osobliwościom odpowiadają obszary o niezerowej miere na powierzchni izoenergetycznej, czyli w przestrzeni $d-1 = 1-1 = 0$ wymiarowej.



Punkty osobliwe w RBZ



Komentarz: Policzmyś-7 dla $E_k = -2t \cos ka$

$$\nu(E) = \frac{2}{\pi} \left| \frac{dE_k}{dk} \right|^{-1} = \frac{2}{\pi} \frac{1}{2ta |\sin ka|}$$

$$\underline{d=2} : E_{\underline{u}} = -2t(\cosh_x a + \cosh_y a)$$

$$\nabla_{\underline{u}} E_{\underline{u}} = 2ta(\sinh_x a, \sinh_y a)$$

$$\nabla_{\underline{u}} E_{\underline{u}} = 0 : 1^\circ \bar{u} = (0, 0), E_{\underline{u}} = -2t \cdot 2 = -4t$$

biegun (0,0)

$$2^\circ \bar{u} \bar{a} = (\bar{u}, \bar{u}), (\bar{u}, -\bar{u}), (-\bar{u}, -\bar{u}), (-\bar{u}, \bar{u})$$

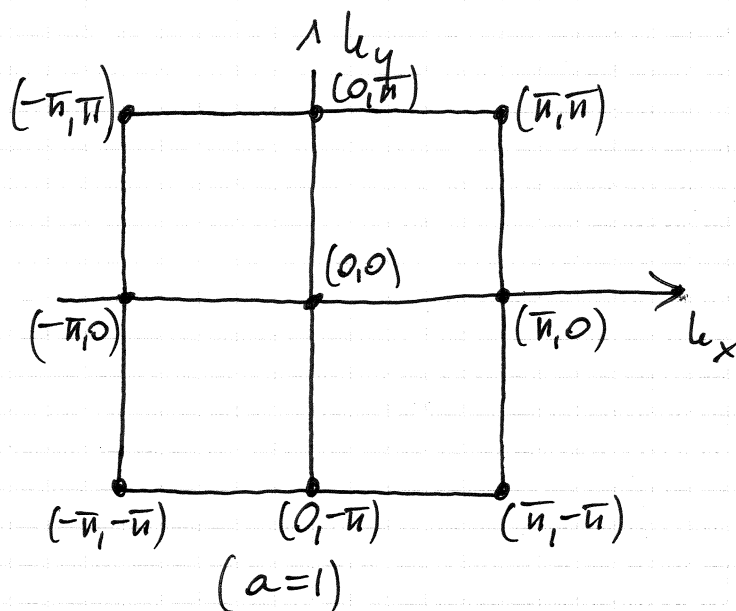
$$E_{\underline{u}} = -2t \cdot (-2) = 4t$$

biegun $(\bar{u}, \bar{u})$

$$3^\circ \bar{u} \bar{a} = (\bar{u}, 0), (-\bar{u}, 0), (0, \bar{u}), (0, -\bar{u})$$

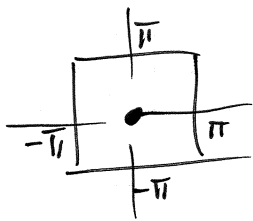
$$E_{\underline{u}} = -2t(-1+1) = 0$$

biegun $(\bar{u}, 0)$



Powierchnie izoenergetyczne:

$$1^{\circ} E_k = E = -4t, \quad -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) = -4t$$

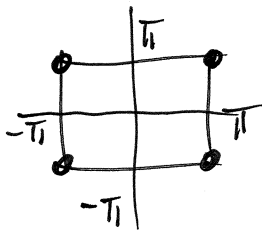


$$\cos k_x a + \cos k_y a = 2$$

$$k_x = k_y = 0$$

$$\text{miara powierzchni} = 0$$

$$2^{\circ} E_k = E = 4t, \quad -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) = 4t$$



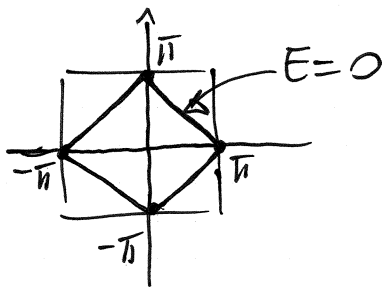
$$\cos k_x a + \cos k_y a = -2$$

$$k_x = \pm \pi, \quad k_y = \pm \pi$$

$$\text{miara powierzchni} = 0$$

$$3^{\circ} E_k = E = 0, \quad -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) = 0$$

$$\cos k_x a + \cos k_y a = 0$$



$$\cos k_y a = -\cos k_x a = \cos(\pi - k_x a) = \cos(\pi + k_x a)$$

$$k_y a = \pi - k_x a, \pi + k_x a, -(\pi - k_x a), -(\pi + k_x a)$$

$$k_y = \frac{\pi}{a} \pm k_x, -\frac{\pi}{a} \pm k_x$$

$$\text{miara powierzchni} = 4\sqrt{2} \frac{\pi}{a}$$

Gęstość stanów:

1° Biegun $(0,0)$: w otoczeniu biegunu

$$\begin{aligned}\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} &= 2\hbar a (\sin k_x a, \sin k_y a) = 2\hbar a (k_x a, k_y a) = \\ &= 2\hbar a^2 (k_x, k_y)\end{aligned}$$

$$\nu(E=-4t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\substack{k(\delta) \\ (k=\delta)}} \frac{dS_E}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^\delta \int_0^{2\pi} \frac{k dk d\varphi}{2\hbar a^2 \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} =$$

koło o promieniu δ i środku $(0,0)$

$$S_E = \pi \delta^2 \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} 0$$

$$= \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^\delta \int_0^{2\pi} \frac{k dk d\varphi}{2\hbar a^2 k} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{2\pi \delta}{2\hbar a^2} = 0$$

2° Bieguny (π, π) : w otoczeniu biegunu (π, π)

$$\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} = -2\hbar a (\pi - k_x a, \pi - k_y a) = -2\hbar a^2 \left(\frac{\pi}{a} - k_x, \frac{\pi}{a} - k_y \right)$$

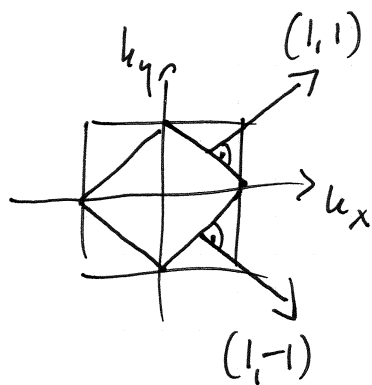
$$|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}| = 2\hbar a^2 \underbrace{\sqrt{(k_x - \frac{\pi}{a})^2 + (k_y - \frac{\pi}{a})^2}}_{\delta} \quad \text{długość wektora punktu } (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$$

i analogicznie dla punktów $(\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a})$, $(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, $(-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a})$

czyli

$$\nu(E=4t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} 4 \int_{k(\delta)} \frac{dS_E}{|\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} = \lim_{\delta \rightarrow 0} 4 \frac{2\pi \delta}{2\hbar a^2} = 0$$

3° Biegun $(\bar{n}, 0)$: $\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|_{k_x, k_y} = \begin{cases} \pm \frac{\pi}{a} - k_x \\ \pm \frac{\pi}{a} + k_x \end{cases} =$



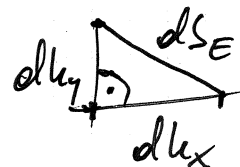
$$= 2ta(\sinh k_x a, \sinh k_y a) \Big|_{k_y = \begin{cases} \pm \frac{\pi}{a} - k_x \\ \pm \frac{\pi}{a} + k_x \end{cases}} =$$

$$= 2ta(\sinh k_x a, \pm \sinh k_x a) = 2ta \sinh k_x a (1, \pm 1)$$

$$V(E=0) = \int_{E_{\underline{k}}=0} \frac{dS_E}{2ta|\sinh k_x a|\sqrt{2}} =$$

$$dS_E = \sqrt{(dk_x)^2 + (dk_y)^2} = |dk_x| \sqrt{1 + \left(\frac{dk_y}{dk_x}\right)^2} =$$

$$= \sqrt{2} |dk_x|$$



$$= 4 \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\sqrt{2} dk_x}{2\sqrt{2} ta \sinh k_x a} = \frac{2}{ta} \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_x}{\sinh k_x a} =$$

$$= \frac{2}{ta} \left(\int_0^{\delta} + \int_{\delta}^{\frac{\pi}{a}-\delta} + \int_{\frac{\pi}{a}-\delta}^{\frac{\pi}{a}} \right) \frac{dk_x}{\sinh k_x a} = \frac{2}{at} \left[\int_0^{\delta} \frac{dk_x}{k_x a} + \int_{\delta}^{\frac{\pi}{a}-\delta} \frac{dk_x}{\sinh k_x a} + \int_{\frac{\pi}{a}-\delta}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk_x}{\pi - k_x a} \right] =$$

$$= \frac{2}{a^2 t} \left[\ln \delta a - \lim_{x \rightarrow 0} \ln |x| + a \int_{\delta}^{\frac{\pi}{a}-\delta} \frac{dk_x}{\sinh k_x a} + \right.$$

$$\left. - \ln |\pi - x| \right|_{\frac{\pi}{a}-\delta a}^{\frac{\pi}{a}} = \frac{2}{a^2 t} \left[2 \ln(\delta a) - 2 \lim_{x \rightarrow 0} \ln |x| + a \int_{\delta}^{\frac{\pi}{a}-\delta} \frac{dk_x}{\sinh k_x a} \right] \rightarrow$$

$\rightarrow \infty$

skończona
wartość,
fca podcałkowa
nie ma osobliwości

czyli $\nu(E)$ ma w $E=0$ logarytmiczną osobliwość

$$\nu(E=0) \sim -\lim_{E \rightarrow 0} \ln|E|$$

co można jeszcze potwierdzić bezpośrednim rachunkiem

$$\begin{aligned}\nu(E=0) &= \frac{2}{\pi a} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dx}{\sin k_x a} = \frac{2}{\pi a^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dx}{\sin x} = \frac{2}{\pi a^2} \ln \left| \operatorname{tg} \frac{x}{2} \right| \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = \\ &= \frac{2}{\pi a^2} \left(\ln \left| \operatorname{tg} \frac{\pi}{2} \right| - \ln \left| \operatorname{tg} 0 \right| \right) = +\infty\end{aligned}$$

Komentarz: Ogólny, nie dotyczy jedynie sieci kwadratowej.

Jeśli zdefiniujemy kątowo-rozdzieloną gęstość stanów (angle-resolved density of states) $\nu(E, \bar{u})$:

$$\nu(E) = \int_{E_{\underline{u}}=E} \nu(E, \bar{u}) dS_{\underline{u}}$$

czyli

$$\nu(E, \bar{u}) = \frac{1}{|D_{\underline{u}} E_{\underline{u}}|}$$

to każda osobliwość van Hove'a jest jednocześnie osobliwością kątowo-rozdzielonej gęstości stanów.

Density of states of a tight-binding energy band

$$\zeta_{\underline{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu, \quad \varepsilon_{\underline{k}} = \zeta_{\underline{k}} + \mu$$

$$\nabla_{\underline{k}} \zeta_{\underline{k}} = 2t(\sin k_x, \sin k_y), \quad |\nabla_{\underline{k}} \zeta_{\underline{k}}| = 2t\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}$$

Singularities of a density of states

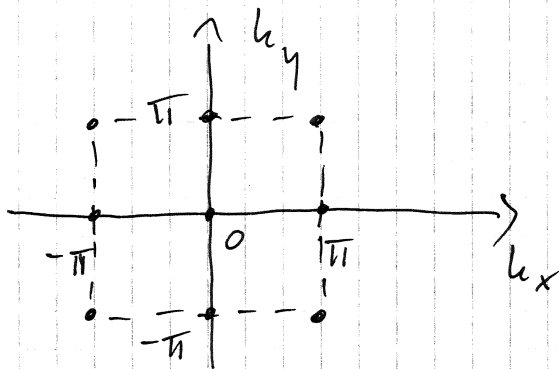
$$N(\omega) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \frac{ds}{|\nabla_{\underline{k}} \zeta_{\underline{k}}|}$$

$\zeta_{\underline{k}} = \omega$

are determined by $|\nabla_{\underline{k}} \zeta_{\underline{k}}|$ nodes, that is by a condition

$\sin k_x = \sin k_y = 0$, which in the first Brillouin zone yields wave vectors

$$(k_x, k_y) = (0, 0), (\pi, \pi), (-\pi, -\pi), (\pi, -\pi), (-\pi, \pi),$$
$$(0, \pi), (0, -\pi), (\pi, 0), (-\pi, 0)$$



which correspond to the energy $\varepsilon_{\underline{k}} = \sum_{\underline{k}} + \mu$ levels
and a Fermi level given by $\sum_{\underline{k}} = 0 \Rightarrow \varepsilon_{\underline{k}} = \mu$:

(k_x, k_y) :

$(0, 0) \longrightarrow \varepsilon_{\underline{k}} = -4t$ (Fermi level for $\mu = -4t$,
 $n = 0$ filling)

$\left. \begin{array}{l} (\pi, \pi) \\ (-\pi, -\pi) \\ (\pi, -\pi) \\ (-\pi, \pi) \end{array} \right\} \longrightarrow \varepsilon_{\underline{k}} = 4t$ (Fermi level for $\mu = 4t$,
 $n = 2$ filling)
(called (π, π) pole)

$\left. \begin{array}{l} (0, \pi) \\ (0, -\pi) \\ (\pi, 0) \\ (-\pi, 0) \end{array} \right\} \longrightarrow \varepsilon_{\underline{k}} = 0$ (Fermi level for $\mu = 0$,
 $n = 1$ filling - half filling)

(called $(0, \pi)$ pole)

The above "hand waving" arguments are supported by a rigorous calculation of the density of states,

$$N(\omega) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{\vec{k}=\omega} \frac{dS}{|\nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}|} = \frac{1}{(2\pi)^2 t} \int \frac{dS}{\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}} \quad -2t(\cosh k_x + \cosh k_y) - \mu = \omega$$

A constant energy sheet

$$-2t(\cosh k_x + \cosh k_y) - \mu = \omega$$

$$\cosh k_x + \cosh k_y = -\frac{\mu + \omega}{2t}$$

leads to

$$d(\cosh k_x + \cosh k_y) = 0$$

$$-\sinh k_x dk_x - \sinh k_y dk_y = 0$$

$$dk_y = -\frac{\sinh k_x}{\sinh k_y} dk_x$$

and

$$dS = \sqrt{(dk_x)^2 + (dk_y)^2} = \sqrt{1 + \frac{\sin^2 k_x}{\sin^2 k_y}} dk_x = \frac{1}{|\sinh k_y|} \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y} dk_x$$

which gives the density of states integral

$$N(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2 t} \int \frac{1}{|\sinh k_y|} \frac{\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}}{\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}} dk_x = \frac{1}{(2\pi)^2 t} \int \frac{dk_x}{|\sinh k_y|} \quad -2t(\cosh k_x + \cosh k_y) - \mu = \omega$$

$$|\sinh y| = \sqrt{1 - \cosh^2 y} \quad \text{and} \quad \cosh y = -\frac{\mu + \omega}{2t} - \cosh x \quad \text{so}$$

$$|\sinh y| = \sqrt{1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2}$$

$$\text{constraints on } \cosh x : \quad -1 \leq \cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t} \leq 1$$

$$-1 - \frac{\mu + \omega}{2t} \leq \cosh x \leq 1 - \frac{\mu + \omega}{2t}$$

and actually we have

$$\max\left(-1, -1 - \frac{\mu + \omega}{2t}\right) \leq \cosh x \leq \min\left(1, 1 - \frac{\mu + \omega}{2t}\right)$$

Therefore, for

$$\mu + \omega \geq 0 : \quad -1 \leq \cosh x \leq 1 - \frac{\mu + \omega}{2t} \quad \text{if} \quad 1 - \frac{\mu + \omega}{2t} \geq -1$$

$$\frac{\mu + \omega}{2t} \leq 2$$

$$\frac{\mu + \omega}{4t} \leq 1$$

and integral within the above $\cosh x$ limits is to be multiplied by $\Theta\left(1 - \frac{\mu + \omega}{4t}\right)$

$$\mu + \omega < 0 : \quad -1 - \frac{\mu + \omega}{2t} \leq \cosh x \leq 1 \quad \text{if} \quad 1 \geq -1 - \frac{\mu + \omega}{2t}$$

$$\frac{\mu + \omega}{2t} \geq -1$$

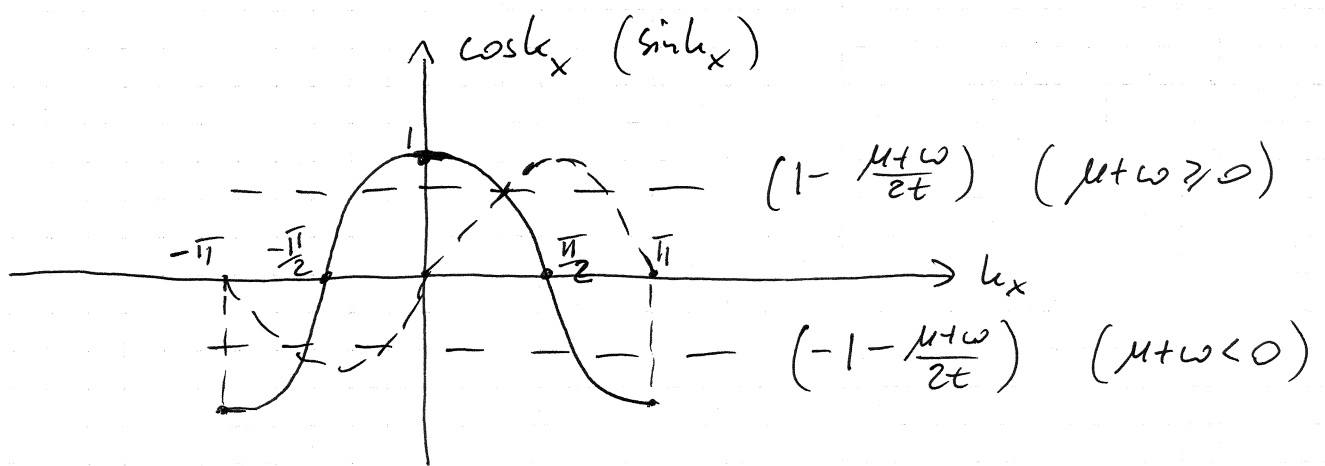
and integral within these $\cosh x$ limits is to be multiplied with $\Theta\left(1 + \frac{\mu + \omega}{4t}\right)$

We can write now

$$(2\pi)^2 t N(\omega) = \begin{cases} \Theta\left(1 - \frac{\mu + \omega}{4t}\right) \int_{-1 \leq \cosh x \leq 1 - \frac{\mu + \omega}{2t}} \left[1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}} dx & \text{for } \mu + \omega \geq 0 \\ \Theta\left(1 + \frac{\mu + \omega}{4t}\right) \int_{-1 - \frac{\mu + \omega}{2t} \leq \cosh x \leq 1} \left[1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}} dx & \text{for } \mu + \omega < 0 \end{cases}$$

and change a variable of integration

$$d(\cosh x) = -\sinh x dx = \begin{cases} -\sqrt{1 - \cosh^2 x} dx & \text{for } \sinh x \geq 0 \\ \sqrt{1 - \cosh^2 x} dx & \text{for } \sinh x < 0 \end{cases}$$



For $\mu + \omega > 0$ we have

$$\begin{aligned}
 (2\pi)^2 t N(\omega) &= \Theta\left(1 - \frac{\mu + \omega}{4t}\right) \left\{ \int_{-1}^{1 - \frac{\mu + \omega}{2t}} \left[1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2\right]^{-1/2} \left[1 - \cosh^2 x\right]^{-1/2} d(\cosh x) \right. \\
 &\quad \left. + \int_{1 - \frac{\mu + \omega}{2t}}^{-1} \left[1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2\right]^{-1/2} \left(-\left[1 - \cosh^2 x\right]^{-1/2}\right) d(\cosh x) \right\} = \\
 &= 2\Theta\left(1 - \frac{\mu + \omega}{4t}\right) \int_{-1}^{1 - \frac{\mu + \omega}{2t}} \left[1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2\right]^{-1/2} \left[1 - \cosh^2 x\right]^{-1/2} d(\cosh x) = \\
 &= 2\Theta\left(1 - \frac{a}{2}\right) \int_{-1}^{1-a} \left[1 - (\cosh x + a)^2\right]^{-1/2} \left[1 - \cosh^2 x\right]^{-1/2} d(\cosh x) = \\
 &= 2\Theta\left(1 - \frac{a}{2}\right) \int_{-1}^{1-a} \left[1 - (x+a)^2\right]^{-1/2} \left[1 - x^2\right]^{-1/2} dx
 \end{aligned}$$

where $a = \frac{\mu + \omega}{2t}$

For $\mu + \omega < 0$ we have

$$\begin{aligned}
 (2\pi)^2 t N(\omega) &= \Theta\left(1 + \frac{\mu + \omega}{4t}\right) \left\{ \int_{-1 - \frac{\mu + \omega}{2t}}^1 \left[1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2\right]^{-1/2} \left[1 - \cosh^2 x\right]^{-1/2} d(\cosh x) \right. \\
 &\quad \left. + \int_1^{-1 - \frac{\mu + \omega}{2t}} \left[1 - \left(\cosh x + \frac{\mu + \omega}{2t}\right)^2\right]^{-1/2} \left(-\left[1 - \cosh^2 x\right]^{-1/2}\right) d(\cosh x) \right\} = \\
 &= 2\Theta\left(1 + \frac{a}{2}\right) \int_{-1-a}^1 \left[1 - (x+a)^2\right]^{-1/2} \left[1 - x^2\right]^{-1/2} dx
 \end{aligned}$$

$$(2\pi)^2 t N(\omega) = \begin{cases} 2\theta(1-\frac{a}{2}) \int_{-1}^{1-a} [1-(x+a)^2]^{-1/2} [1-x^2]^{-1/2} dx & \text{for } a \geq 0 \\ 2\theta(1+\frac{a}{2}) \int_{-1-a}^{-1} [1-(x+a)^2]^{-1/2} [1-x^2]^{-1/2} dx & \text{for } a < 0 \end{cases}$$

$$\text{For } a \geq 0 : \int_{-1}^{1-a} [1-(x+a)^2]^{-1/2} [1-x^2]^{-1/2} dx =$$

$$= \int_{-1+\frac{a}{2}}^{1-\frac{a}{2}} [1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} dy =$$

$$\left\{ \begin{array}{l} y = x + \frac{a}{2} \\ x = y - \frac{a}{2} \\ x+a = y + \frac{a}{2} \end{array} \right\} \begin{array}{l} -1+\frac{a}{2} \\ \text{even function} \\ -1+\frac{a}{2} \end{array} = \int_{-(1-\frac{a}{2})}^{1-\frac{a}{2}} [1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} dy =$$

$$= 2 \int_0^{1-\frac{a}{2}} [1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} dy$$

$$y = (1-\frac{a}{2})z$$

$$[1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} = [1-((1-\frac{a}{2})z+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-((1-\frac{a}{2})z-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} =$$

$$= [1-\frac{a}{2}-(1-\frac{a}{2})z]^{-1/2} [1+\frac{a}{2}+(1-\frac{a}{2})z]^{-1/2} [1+\frac{a}{2}-(1-\frac{a}{2})z]^{-1/2} [1-\frac{a}{2}+(1-\frac{a}{2})z]^{-1/2} =$$

$$= (1-\frac{a}{2})^{-1} (1+\frac{a}{2})^{-1} [1-z^2]^{-1/2} [1-(\frac{1-\frac{a}{2}}{1+\frac{a}{2}})^2 z^2]^{-1/2}$$

$$2 \int_0^{1+\frac{a}{2}} \left[1 - \left(y + \frac{a}{2}\right)^2\right]^{-1/2} \left[1 - \left(y - \frac{a}{2}\right)^2\right]^{-1/2} dy =$$

$$= 2\left(1 - \frac{a}{2}\right) \int_0^1 \left(1 - \frac{a}{2}\right)^{-1} \left(1 + \frac{a}{2}\right)^{-1} \left[1 - z^2\right]^{-1/2} \left[1 - \left(\frac{1 - \frac{a}{2}}{1 + \frac{a}{2}}\right)^2 z^2\right]^{-1/2} dz =$$

$$= 2\left(1 + \frac{a}{2}\right)^{-1} \int_0^1 \left[1 - z^2\right]^{-1/2} \left[1 - \left(\frac{1 - \frac{a}{2}}{1 + \frac{a}{2}}\right)^2 z^2\right]^{-1/2} dz =$$

$$= 2\left(1 + \frac{a}{2}\right)^{-1} K\left[\left(\frac{1 - \frac{a}{2}}{1 + \frac{a}{2}}\right)^2\right] = 2\left(1 + \frac{|a|}{2}\right)^{-1} K\left[\left(\frac{1 - \frac{|a|}{2}}{1 + \frac{|a|}{2}}\right)^2\right]$$

where

$$K(m) = \int_0^1 \left[(1-t^2)(1-mt^2)\right]^{-1/2} dt$$

is the complete elliptic integral of the first kind

$$\text{For } a < 0 : \int_{-1-a}^1 [1-(x+a)^2]^{-1/2} [1-x^2]^{-1/2} dx =$$

$$y = x + \frac{a}{2}$$

$$= \int_{-1-\frac{a}{2}}^{1+\frac{a}{2}} [1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} dy =$$

$$= 2 \int_0^{1+\frac{a}{2}} [1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} dy$$

$$y = (1 + \frac{a}{2})z$$

$$[1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} = [1-((1+\frac{a}{2})z+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-((1+\frac{a}{2})z-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} =$$

$$= [1-\frac{a}{2}-(1+\frac{a}{2})z]^{-1/2} [1+\frac{a}{2}+(1+\frac{a}{2})z]^{-1/2} [1+\frac{a}{2}-(1+\frac{a}{2})z]^{-1/2} [1-\frac{a}{2}+(1+\frac{a}{2})z]^{-1/2} =$$

$$= (1-\frac{a}{2})^{-1} (1+\frac{a}{2})^{-1} [1-z^2]^{-1/2} [1-(\frac{1+\frac{a}{2}}{1-\frac{a}{2}})^2 z^2]^{-1/2}$$

$$2 \int_0^{1+\frac{a}{2}} [1-(y+\frac{a}{2})^2]^{-1/2} [1-(y-\frac{a}{2})^2]^{-1/2} dy =$$

$$= 2(1+\frac{a}{2}) \int_0^1 (1-\frac{a}{2})^{-1} (1+\frac{a}{2})^{-1} [1-z^2]^{-1/2} [1-(\frac{1+\frac{a}{2}}{1-\frac{a}{2}})^2 z^2]^{-1/2} dz =$$

$$= 2(1-\frac{a}{2})^{-1} K \left[\left(\frac{1+\frac{a}{2}}{1-\frac{a}{2}} \right)^2 \right] = 2(1+\frac{|a|}{2}) K \left[\left(\frac{1-\frac{|a|}{2}}{1+\frac{|a|}{2}} \right)^2 \right]$$

Therefore, either for $a \geq 0$ or for $a < 0$ we get the same value of the integral and finally we can write the density of states

$$(2\pi)^2 t N(\omega) = 4 \frac{\theta(1 - \frac{|a|}{2})}{1 + \frac{|a|}{2}} K \left[\left(\frac{1 - \frac{|a|}{2}}{1 + \frac{|a|}{2}} \right)^2 \right]$$

$$N(\omega) = \frac{1}{\pi^2 t} \theta(1 - \frac{|a|}{2}) \frac{1}{1 + \frac{|a|}{2}} K \left[\left(\frac{1 - \frac{|a|}{2}}{1 + \frac{|a|}{2}} \right)^2 \right]$$

using a mathematical identity

$$K(m) = 2 \left[1 + m_1^{\frac{1}{2}} \right]^{-1} K \left(\left(\frac{1 - m_1^{\frac{1}{2}}}{1 + m_1^{\frac{1}{2}}} \right)^2 \right)$$

where $m_1 = 1 - m$

we get $m_1^{\frac{1}{2}} = \frac{|a|}{2}$, $m_1 = \frac{|a|^2}{4}$, $m = 1 - \frac{a^2}{4}$

and

$$N(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 t} \theta(1 - \frac{|a|}{2}) K(1 - \frac{a^2}{4}) =$$

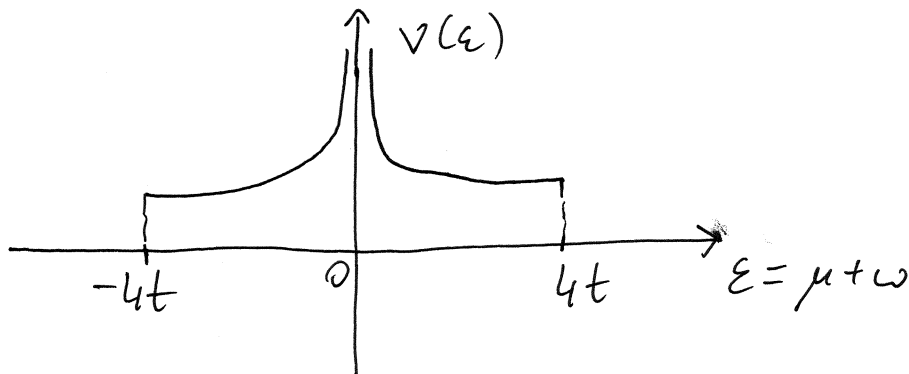
$$= \frac{1}{2\pi^2 t} \theta(1 - \frac{|\mu + \omega|}{2t}) K(1 - \frac{(\mu + \omega)^2}{16t^2}) =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 t} \theta(4t - |\mu + \omega|) K(1 - \frac{(\mu + \omega)^2}{16t^2})$$

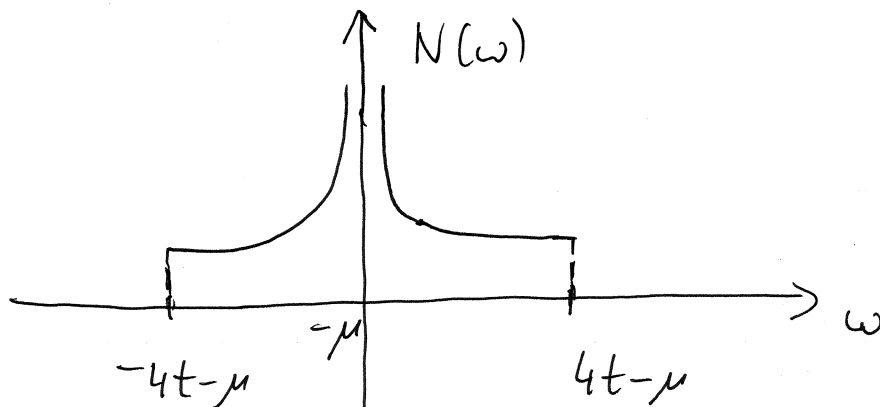
We can define $\nu(\epsilon) = \nu(\mu + \omega) = N(\omega)$,

then

$$\nu(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2 t} \Theta(4t - |\epsilon|) K\left(1 - \frac{\epsilon^2}{16t^2}\right)$$



$$N(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 t} \Theta(4t - |\mu + \omega|) K\left(1 - \frac{(\mu + \omega)^2}{16t^2}\right)$$



$(k_x, k_y):$

$(0, 0)$

pole

$(0, \pi)$

pole

(π, π)

pole

Inną, prostą metodą obliczania gęstości stanów szczególnie użyteczną w obliczeniach numerycznych jest zwyczajne sumowanie stanów

$$\nu(E) = 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \delta_{E_{\underline{k}}, E} = \frac{2}{(2\pi)^d} \int_{\text{RBZ}} d^d \underline{k} \delta(E_{\underline{k}} - E)$$

ponieważ $d^d \underline{k} = \frac{dS_{E_{\underline{k}}}}{|v_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} dE_{\underline{k}}$ to

$$\begin{aligned} \nu(E) &= \frac{2}{(2\pi)^d} \int_{\text{RBZ}} d^d \underline{k} \delta(E_{\underline{k}} - E) = \frac{2}{(2\pi)^d} \int_0^\infty dE_{\underline{k}} \int_{E_{\underline{k}} = \text{const}} \frac{dS_{E_{\underline{k}}}}{|v_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} \delta(E_{\underline{k}} - E) = \\ &= \frac{2}{(2\pi)^d} \int_{E_{\underline{k}} = E} \frac{dS_E}{|v_{\underline{k}} E_{\underline{k}}|} \end{aligned}$$

czyli odzyskujemy naszą pierwotną definicję gęstości stanów.