Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik
http://www.tu-berlin.de/?qmii_1718

29. November 2017

Prof. Dr. Dr. h.c. Eckehard Schöll, PhD
MSc. Rico Berner, Dr. Javier Cerrillo, Dr. Benjamin Lingnau

7. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Mo. 11.12.2017 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude

Aufgabe 16 (6 Punkte): *Hubbard-Modell mit zwei Plätzen*

Das Hubbard-Modell beschreibt ein System gekoppelter Gitterplätze, die jeweils maximal von zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin besetzt werden können. Dort wirkt eine kurzreichweitige Coulomb-Wechselwirkung der Stärke U und es gibt Übergänge zwischen den Gitterplätzen mit dem Matrixelement $-t$ (von engl. transition). Auf die zwei Gitterplätze L (links) und R (rechts) reduziert, lautet der Hamiltonian

$$\begin{aligned}\hat{H} &= U \sum_{j\in\{L,R\}} \hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow} - t \sum_{\sigma\in\{\uparrow,\downarrow\}} \left(a^\dagger_{L\sigma}a_{R\sigma} + a^\dagger_{R\sigma}a_{L\sigma}\right) \\ &= U \sum_{j\in\{L,R\}} a^\dagger_{j\uparrow}a^\dagger_{j\downarrow}a_{j\downarrow}a_{j\uparrow} - t \sum_{\sigma\in\{\uparrow,\downarrow\}} \left(a^\dagger_{L\sigma}a_{R\sigma} + a^\dagger_{R\sigma}a_{L\sigma}\right).\end{aligned}$$

Wir nehmen an, dass sich zwei Elektronen im System befinden.

(a) Bestimmen Sie die Wirkung von $\hat{H}$ auf $|\uparrow,\uparrow\rangle$ bzw. $|\downarrow,\downarrow\rangle$, also für den Fall, dass beide Elektronen den gleichen Spin haben. Der Zustand $|\circ,\circ\rangle$ ist durch die Besetzung des $|$linken, rechten$\rangle$ Gitterplatzes definiert.

(b) Stellen Sie nun unter der Annahme unterschiedlicher Spins den Hamiltonian in den Zuständen $\{|\uparrow\downarrow,0\rangle,|\uparrow,\downarrow\rangle,|\downarrow,\uparrow\rangle,|0,\uparrow\downarrow\rangle\}$ dar und berechnen Sie hierzu die Eigenenergien und die entsprechenden Eigenzustände. Was ist der Grundzustand? Werden also gleiche oder unterschiedliche Spins bevorzugt?

Aufgabe 17 (8 Punkte): *Ein tight-binding-Modell mit Bändern*

Wie entstehen Bänder? Als Beispiel betrachten wir den einfachen Hamiltonian

$$\hat{H}_0 = v\sum_j (-1)^j c^\dagger_j c_j - t\sum_j \left(c^\dagger_j c_{j+1} + c^\dagger_{j+1}c_j\right).$$

Die $c^\dagger_j$ erzeugen je ein Elektron am Gitterplatz j, $-t$ ist das Matrixelement für einen Übergang zwischen den Gitterplätzen. Der erste Term sorgt dafür, dass sich die Bindungsenergien benachbarter Gitterplätze um $\pm v$ unterscheiden. Wir wenden auf diesen Hamiltonian eine diskrete Fouriertransformation an, indem wir schreiben $c^\dagger_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ijk}c^\dagger_k$, wobei N die Anzahl der Gitterplätze ist. Anders als in Aufgabe 13 ist es hier entscheidend, wo die Werte von k liegen, über die summiert wird, nämlich im halboffenen Intervall $[-\pi,\pi)$. Dabei gilt $\sum_j e^{ij(k-k')} = N\sum_m \delta_{k,k'+2\pi m}$.

(a) Bringen Sie den Hamiltonian auf die Form

$$\hat{H}_0 = \sum_{k\in\left[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right)} \left(\epsilon_k c^\dagger_k c_k - \epsilon_k c^\dagger_{k+\pi}c_{k+\pi} + v c^\dagger_k c_{k+\pi} + v c^\dagger_{k+\pi}c_k\right)$$

mit $\epsilon_k = -2t\cos(k)$.

(b) Betrachten Sie die k-Summanden von $\hat{H}_0$ als Matrix und zeigen Sie so, dass wir schreiben können

$$\hat{H}_0 = \sum_{k\in\left[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right)} \left(-E_k a^\dagger_k a_k + E_k b^\dagger_k b_k\right)$$

mit $E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + v^2}$ und Eigenzuständen, erzeugt von $a^\dagger_k = u_k c^\dagger_k + v_k c^\dagger_{k+\pi}$ und $b^\dagger_k = v_k c^\dagger_k - u_k c^\dagger_{k+\pi}$ mit $u_k^2 + v_k^2 = 1\forall k$. Erklären Sie, warum jetzt zwei Bänder vorliegen.

(c) Plotten Sie dazu die Bandstruktur des Systems, d.h. die möglichen Teilchenenergien als Funktion von k.

Aufgabe 18 (6 Punkte): *Coulomb-Wechselwirkung im Exziton*

Wir betrachten das Modell aus Aufgabe 17 nun mit zusätzlicher Coulombwechselwirkung, also den Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, wobei wir $\hat{H}_0$ aus der vorigen Aufgabe nehmen und

$$\hat{V} = U \sum_j \hat{n}_j \hat{n}_{j+1} = U \sum_j \left(c_{2j}^\dagger c_{2j+1}^\dagger c_{2j+1} c_{2j} + c_{2j}^\dagger c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1} c_{2j} \right).$$

(a) Führen Sie die Fourier-Transformation auch für $\hat{V}$ in der gegebenen Zerlegung durch und zeigen Sie, dass gilt

$$\begin{aligned} \hat{V} \;=\; & \frac{2u}{N} \sum_{\substack{k_1,k_2,k_3,k_4 \\ \in\left\{-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right\}}} \cos(k_2 - k_3) \left(c_{k_1}^\dagger + c_{k_1+\pi}^\dagger \right) \left(c_{k_2}^\dagger - c_{k_2+\pi}^\dagger \right) \times \\ & \times \left(c_{k_3} - c_{k_3+\pi} \right) \left(c_{k_4} + c_{k_4+\pi} \right) \sum_m \delta_{k_1+k_2,k_3+k_4+\pi m} \end{aligned}$$

(b) Wir betrachten jetzt ein System, bei dem das untere Band komplett besetzt und das obere Band komplett leer ist. Die wichtige Physik wird sich dann an der Fermikante abspielen, also bei $k = \pi/2$. Wir machen einige Vereinfachungen:

1. Für $k = \pi/2$ können wir zeigen, dass $v_k = u_k = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Dieses Resultat verwenden wir als Näherung für alle k.

2. Wenn wir davon ausgehen, dass das Exziton hinreichend ausgedehnt ist, dürfen wir $\cos(k_2 - k_3) \approx 1$ nähern.

4. Wir nehmen an, dass Terme mit gleichen k-Indices keine Beiträge liefern, dass also alle Antikommutatoren verschwinden.

Zeigen Sie mit Hilfe dieser Vereinfachungen, dass

$$\hat{V} \approx -\frac{U}{2N} \sum_{\substack{k_1,k_2,k_3,k_4 \\ \in\left\{-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right\}}} a_{k_4} b_{k_2}^\dagger b_{k_3} a_{k_1}^\dagger \sum_m \delta_{k_1+k_2,k_3+k_4+\pi m}.$$

Jetzt haben wir eine anziehende Wechselwirkung zwischen einem Elektron und einem Loch aus einem mikroskopischen Modell hergeleitet (woran sehen wir das?).

Prof. Dr. Dr. h.c. Eckehard Schöll, PhD
MSc. Rico Berner, Dr. Javier Cerrillo, Dr. Benjamin Lingnau

Scheinkriterien:

- Mindestens 50% der Übungspunkte (Abgabe in 3er Gruppen).
- Regelmäßige, aktive Teilnahme an den Tutorien.
- Vorstellen einer Übungsaufgabe im Tutorium.
- Bearbeitung und Vorstellung eines Projektes.

	Mo	**Di**	**Mi**	**Do**	**Fr**
08-10		EW 203		EW 203	
10-12					EW 114
12-14		EW 229			
14-16					
16-18				EW 226	

Sprechstunden			
ES	Prof. Dr. Dr. h.c. Eckehard Schöll, PhD	nach Vereinbarung	EW 735
RB	MSc. Rico Berner	**Di 14-15**	ER 245
JC	Dr. Javier Cerrillo	**Do 13-14**	EW 705
BL	Dr. Benjamin Lingnau	**Mi 13-14**	EW 629