Prof. Dr. Eckehard Schöll, PhD
Dr. Alexander Carmele, Dr. Julia Kabuß, Dr. Steffen Martens, Jan Totz, M.Sc.

7. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Mo. 08.12.2014 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 16 (6 Punkte): *Hubbard Modell mit zwei Plätzen*
Ein Klassiker unter den Modellen, die Magnetismus unter beweglichen Elektronen beschreiben, ist das Hubbard Modell. 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

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

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.

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? Benutzen Sie für die Auswertung ein Programm, wie z.B. Mathematica oder Octave.

Aufgabe 17 (8 Punkte): *Ein tight-binding-Modell mit Bändern*
Wie entstehen Bänder? Als Beispiel betrachten wir den einfachen Hamiltonian

$$\hat{H}_0 = \frac{v}{2}\sum_j (-1)^j c^+_j c_j - t\sum_j \left(c^+_j c_{j+1} + c^+_{j+1}c_j\right).$$

Die c^+_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 $c^+_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ijk}c^+_k$, 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 $[-\pi,\pi)$. Die Relation $\sum_j e^{ij(k-k')} = N\sum_m \delta_{k,k'+2\pi m}$ war in Aufgabe 14 etwas vereinfacht angegeben und wird hier komplett gebraucht.

a) Bringen Sie den Hamiltonian auf die Form

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

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

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

mit $E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + v^2}$ und Eigenzuständen, erzeugt von $a_k^+ = u_k c_c^+ + v_k c_{k+\pi}^+$ und $b_k^+ = v_k c_k^+ - u_k c_{k+\pi}^+$ mit $u_k^2 + v_k^2 = 1 \forall k$. Erklären Sie, warum jetzt zwei Bänder vorliegen.

Aufgabe 18 (6 Punkte): *Coulomb-Wechselwirkung im Exziton*
Wir betrachten den Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, wobei wir $\hat{H}_0$ aus der vorigen Aufgabe nehmen und

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

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

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

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

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

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