

Theoretische Physik: Fortgeschrittene Vielteilchentheorie, Übung 8

Prof. Dr. Hans Peter Büchler WS 2012/13, 4. Dezember 2012

1. Herleitung des Hubbard-Modells (Schriftlich)

Wir betrachten Fermionen auf einem Gitter, wobei die an einem Gitterplatz \vec{r}_i lokalisierte Einteilchenwellenfunktion durch $\phi_{i,\sigma}(\vec{r}) = \chi_\sigma \phi_i(\vec{r})$ mit $\phi_i(\vec{r}) = \phi(\vec{r} - \vec{r}_i)$ und dem Spinor χ_σ gegeben ist. Ein Hamilton-Operator $H = T + V$, bestehend aus dem spinunabhängigen Einteilchenoperator $T = \sum_{\alpha=1}^N t_\alpha$ und einem Zweiteilchenoperator $V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} v(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)$ lässt sich in der Basis $\{\phi_{i,\sigma}\}$ darstellen durch

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma}$$

wobei die Matrixelemente durch $t_{ij} = \langle i|T|j \rangle$ und $V_{ijkl} = \langle ij|V|kl \rangle$ bestimmt sind. Nimmt man an, dass die Überlappung der Wellenfunktionen $\phi_i(\vec{r})$ an verschiedenen Gitterplätzen nur sehr klein ist, so lassen sich die folgenden Näherungen anwenden:

$$t_{ij} = \begin{cases} w & \text{für } i = j, \\ -t & \text{für } i \text{ und } j \text{ benachbart,} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

sowie

$$V_{ijkl} = V \delta_{ij} \delta_{il} \delta_{jk} \quad \text{mit } V = \int d^3x \int d^3y |\phi_i(\vec{x})|^2 v(\vec{x}, \vec{y}) |\phi_i(\vec{y})|^2.$$

- (a) Bestimme das Matrixelemente V für eine Kontaktwechselwirkung

$$V = \frac{\lambda}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \delta(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)$$

zwischen den einzelnen Fermionen. Nehme dazu an, dass ein quadratisches Gitter mit Gitterkonstante a vorliegt und die Wellenfunktionen durch den Grundzustand des Harmonischen Oszillators $\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\Delta^{3/2} \pi^{3/4}} \exp[-\vec{r}^2/(2\Delta^2)]$ gut approximiert ist. Warum ist dies eine so gute Approximation?

- (b) Wieso schreibt man w , jedoch $-t$? Welche physikalische Bedeutung haben die beiden Parameter?
- (c) Bestimme jetzt die Grundzustände bei halber Füllung des Gitters, d.h., mit einer durchschnittlicher Teilchenzahl $n = 1$. Betrachte zuerst den Fall $U = 0$. Dann ist der Grundzustand durch den Fermisee gegeben. Berechne die Grundzustandsenergie. Für kleine Wechselwirkungen $U \ll t$ ist der Grundzustand immer noch durch den Fermisee gegeben und begründe wie sich die Grundzustandsenergie in Störungstheorie verändert. (Bem: Hier bedeutet "halbe Füllung", dass sich auf jedem Gitterplatz ein Teilchen befindet. "Ganze Füllung" würde bedeuten, dass sich auf jedem Gitterplatz zwei Teilchen mit unterschiedlichem Spin befinden.)

- (d) Betrachte jetzt den Bereich mit $t = 0$. Wie sieht der Grundzustand in diesem Regime aus und wie gross ist seine Grundzustandsenergie? Dieser Grundzustand wird Mott Isolator genannt. Warum ist der Grundzustand entartet? Wir können nun wieder in Störungstheorie den Bereich $U \gg t$ untersuchen. Folgere aus dieser Analyse, dass es einen Phasenübergang gibt zwischen einem Metal für kleine Wechselwirkungen und einem Isolator für grosse Wechselwirkungen.

2. Paar-Korrelation (Übungsstunde)

Die Paar-Korrelation gibt uns die relative Wahrscheinlichkeit bei \mathbf{r}' ein Elektron im Spinzustand s' zu finden, wenn mit Sicherheit am Ort \mathbf{r} ein Elektron im Spinzustand s ist. Die Paar-Korrelation ist definiert durch

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \left\langle \Phi_0 \left| \Psi_s^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{s'}^\dagger(\mathbf{r}') \Psi_{s'}(\mathbf{r}') \Psi_s(\mathbf{r}) \right| \Phi_0 \right\rangle. \quad (1)$$

Dabei ist $|\phi_0\rangle$ der Grundzustand der Fermionen im Fermisee mit einer totalen Dichte $n = n_\uparrow + n_\downarrow$ und daher $n_\uparrow = n_\downarrow = n/2$.

- (a) Drücke die Feldoperatoren durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c_{\mathbf{k}s}^\dagger$ und $c_{\mathbf{k},s}$ in der natürlichen Basis aus. Dabei treten nun Erwartungswerte von der Form

$$\langle \Phi_0 | c_{\mathbf{p}s}^\dagger c_{\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{q}'s'} c_{\mathbf{p}'s'} | \Phi_0 \rangle \quad (2)$$

auf. Berechne diese Erwartungswerte explizit. Welche Bedingungen an p, p', q, q' und s, s' müssen erfüllt sein, damit die Amplituden von Null verschieden sind.

- (b) Betrachte zuerst den Fall $s \neq s'$ und benutze obiges Resultat um die Paar-Korrelation explizit auszurechnen.
- (c) Betrachte jetzt den interessanteren Fall $s = s'$ und bestimme die Paar-Korrelationsfunktion. Skizziere das Resultat.
- (d) Zeige, dass das Korrelationsloch gerade ein Elektron verdrängt.