Vielteilchentheorie WS 13/14

Aufgabenblatt 5

J. Sirker und P. Korell

Freitag, 17.1.14

1. **Das Su-Schrieffer-Heeger Modell**

Ein eindimensionales Gittermodell bei halber Füllung (ein Elektron pro Platz) kann seine Energie durch eine periodische Verzerrung des Gitters reduzieren; dies ist die sogenannte Peierls Instabilität. Das Su-Schrieffer-Heeger (SSH) Modell beschreibt das Hüpfen der Elektronen auf einem solchen verzerrten Gitter. Mit u_n als Verschiebung des n-ten Atoms aus der Gleichgewichtsposition können wir dieses Modell schreiben als

$$H = -t\sum_{n=1}^{N}(1+u_n)\left[c^\dagger_{n\sigma}c_{n+1\sigma}+c^\dagger_{n+1\sigma}c_{n\sigma}\right]+\sum_{n=1}^{N}\frac{k_s}{2}(u_{n+1}-u_n)^2, \quad (1)$$

wobei eine Summation über den Spinindex σ impliziert ist und wir periodische Randbedingungen annehmen. Der erste Term beschreibt das Hüpfen moduliert durch die Gitterverzerrung. Der zweite Term die elastische Energie, die die Verzerrung kostet, wobei k_s eine effektive Federkonstante des Gitters sei. Hierbei machen wir die Annahmen, daß die Gitterverzerrung periodisch sei, $u_n = (-1)^n\alpha$, und die Zahl der Gitterplätze gerade.

i) Diagonalisieren Sie diesen Hamiltonoperator! Das Spektrum ist dann gegeben durch $\pm 2t\sqrt{[1+(\alpha^2-1)\sin^2 k]}$. *Hinweise: Führen Sie unterschiedliche Fermionen auf den beiden Untergittern ein (die Einheitszelle hat sich durch die Verzerrung verdoppelt). Nach einer anschließenden Fouriertransformation bleibt eine 2×2 Matrix, die die beiden Fermionenarten koppelt. Diese kann dann diagonalisiert werden. Die notwendige Fouriertransformation ist durch*

$$a_m = \sqrt{\frac{2}{N}}\sum_k e^{2ikm}a_k \text{ mit } k\in[-\pi/2,\pi/2] \quad (2)$$

gegeben.

ii) Zeigen Sie, daß dieses System immer instabil bezüglich einer Peierls Gitterverzerrung ist, indem Sie die gesamte elektronische und elastische Energie des Systems betrachten. Hierzu benötigen Sie das folgende elliptische Integral für $|\alpha|\ll 1$:

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\mathrm{d}k\sqrt{[1+(\alpha^2-1)\sin^2 k]}\approx 2+(a_1-\ln|\alpha|)\alpha^2. \quad (3)$$

Hierbei ist a_1 eine numerische Konstante.

iii) Was würde bei einer ungeraden Anzahl von Gitterplätzen passieren?

2. Das Hubbardmodell

Wir betrachten das sogenannte Hubbardmodell auf einem zweidimensionalen Quadratgitter mit einem Hüpfen zwischen benachbarten Plätzen

$$H = -t \sum_{j;\vec{a}=\vec{x},\vec{y};\sigma} \left[c^\dagger_{j+\vec{a},\sigma} c_{j;\sigma} + \text{H.c.} \right] - \mu \sum_{j\sigma} c^\dagger_{j,\sigma} c_{j;\sigma}. \tag{4}$$

Hierbei ist $n_{j\sigma} = c^\dagger_{j,\sigma} c_{j;\sigma}$ die Zahl der Elektronen mit Spin σ am Platz j und μ das chemische Potential.

i) Finden Sie die Dispersion des Systems.
Hinweis: Fouriertransformation.

ii) Leiten Sie eine Beziehung zwischen der Zahl der Elektronen pro Platz n_e und der Fermifläche bei Temperatur $T = 0$ her.

iii) Zeichnen Sie die Fermifläche für $n_e < 1$ und $n_e = 1$.

iv) Wir wollen nun die Hubbard-Wechselwirkung zwischen den Elektronen $U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$ zum Hamiltonoperator H hinzufügen. Wie sieht diese Wechselwirkung nach einer Fouriertransformation aus?

v) Für Temperaturen, die klein im Vergleich zur Fermienergie sind, sind die einzigen Zustände, die zur Streuung durch die Wechselwirkung beitragen, die nahe der Fermifläche. Was ist besonders an dieser Streuung für $n_e = 1$?

vi) Was passiert mit dieser Streuung ($n_e = 1$), wenn man ein Hüpfen zwischen übernächsten Nachbarn zum Hamiltonoperator hinzufügt?