

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie II SS 13

PROF. A. MIRLIN

Blatt 7

DR. I. V. PROTOPOV, U. BRISKOT, E. KÖNIG

Besprechung 31.05.13

1. Korrektur der Grundzustandsenergie in 2. Ordnung (20 Punkte)

Es gilt, die Korrektur der Grundzustandsenergie eines fast idealen Fermi-Gases in 3D durch die Wechselwirkung in 2. Ordnung zu berechnen.

- (a) Zeichnen Sie zunächst alle Vakuum-Diagramme 2. Ordnung. Zeigen Sie, dass sich drei dieser Diagramme auf die 1. Ordnung zurückführen lassen, indem man die Green'sche Funktion G_0 des nichtwechselwirkenden Systems durch die Green'sche Funktion G des wechselwirkenden Systems ersetzt.
- (b) Geben Sie die von den beiden verbleibenden Diagrammen herrührende Energiekorrektur $\Delta E^{(2)}$ unter Verwendung der Feynman-Regeln in Integralform an und führen Sie dann die Energie-Integrationen über ϵ , ϵ' und ω aus.

Hinweis: Das Ergebnis lautet

$$\frac{\Delta E^{(2)}}{\text{Vol.}} = \frac{1}{2} \int \frac{d^3k d^3k' d^3q}{(2\pi)^9} \frac{(\Theta(\epsilon_{\mathbf{k}}) - \Theta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})) (\Theta(\epsilon_{\mathbf{k}'}) - \Theta(\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}} \cdot (\Theta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}) - \Theta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})) V(\mathbf{q}) (V(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}) - 2V(\mathbf{q})) \quad (1)$$

wobei $\epsilon_{\mathbf{p}} \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu$.

- (c) Zeigen Sie, dass die \mathbf{k}, \mathbf{k}' -Integrationen durch die Θ -Funktionen effektiv auf den Bereich

$$\begin{aligned} |\mathbf{k} + \mathbf{q}| < p_{\text{F}} < |\mathbf{k}| \quad \text{und} \\ |\mathbf{k}' - \mathbf{q}| < p_{\text{F}} < |\mathbf{k}'| \end{aligned} \quad (2)$$

beschränkt werden können. Welche Größenordnung haben diese Integrationsintervalle im Vergleich zu $q \equiv |\mathbf{q}|$? Welche physikalischen Prozesse wählen diese Bedingungen aus?

Im Folgenden soll nun die Coulomb-Wechselwirkung betrachtet werden:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \quad \text{bzw.} \quad V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}. \quad (3)$$

- (d) Nähern Sie den Integranden in (1) für kleine q . Zeigen Sie, dass der erste Term für $q \rightarrow 0$ konvergent ist, während der zweite Term im Infraroten (d.h. bei kleinen q) divergent ist.

- (e) Wie lässt sich diese Divergenz physikalisch verstehen? Welche falsche Annahme oder Näherung geht in die Rechnung ein?
- (f) Welche weiteren Diagramme müssten berücksichtigt werden, um die Divergenz des einen Diagramms zu kürzen? Zeigen Sie, dass eine geeignete Reihe von Diagrammen, die das obige divergente Diagramm enthält, zu einer endlichen Korrektur der Grundzustandsenergie führt.

Hinweis: Sie können die Cluster-Expansion aus Aufgabe 1 Blatt 6 verwenden.

- (g) Überlegen Sie sich, warum Sie nicht die richtige Korrektur der Grundzustandsenergie erhalten, wenn Sie in dem divergenten Diagramm 2. Ordnung eine Coulomb-Wechselwirkungslinie durch eine mittels RPA berechnete, abgeschirmte Linie ersetzen.

2. Effektive Niederenergieetheorie von Graphen

(4+6 Punkte)

Graphen ist ein Material, das aus einer Kohlenstoffmonolage besteht. Die Kohlenstoffrumpfatome bilden durch sp^2 -Hybridisierung ein hexagonales Gitter mit Gitterabstand a , die verbleibenden p_z -Orbitale (senkrecht zur Graphenschicht ausgebildet) sind delokalisiert und bilden ein π -Band.

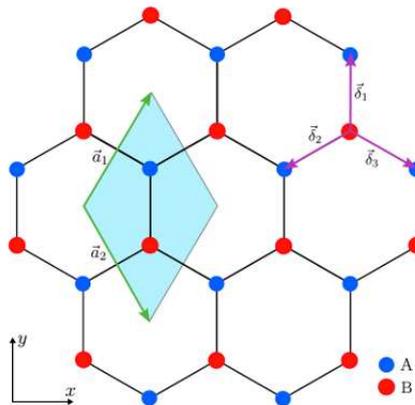


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Graphengitters.

Ziel dieser Aufgabe ist es das Niederenergieverhalten der p_z -Elektronen zu modellieren. Betrachten Sie dazu folgendes *Tight-Binding*-Modell:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\vec{R} \in A, \vec{\delta}_i} \left[\hat{a}_{\vec{R}}^\dagger \hat{b}_{\vec{R}+\vec{\delta}_i} + \text{h.c.} \right]. \quad (4)$$

Hierbei bezeichnen $\hat{a}_{\vec{R}}$ ($\hat{a}_{\vec{R}}^\dagger$) und $\hat{b}_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}$ ($\hat{b}_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}^\dagger$) Vernichter (Erzeuger) eines Zustandes am Gitterplatz \vec{R} respektive $\vec{R} + \vec{\delta}_i$. Die Nächste-Nachbarvektoren sind

$$\vec{\delta}_1 = a(0, 1)^T, \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, -1)^T, \quad \vec{\delta}_3 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1)^T.$$

Wiederholung (Bonusaufgabe)

- (a) Motivieren Sie die Notation zweier unterschiedlicher Operatoren \hat{a} und \hat{b} . Welchem Gitter gehören die Gittervektoren \vec{R} an? Was ist das Bravaisgitter von Graphen?
 (b) Wechseln Sie nun in (Quasi-)Impulsdarstellung:

$$\hat{a}_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \in \text{B.Z.}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \hat{a}_{\vec{k}}, \quad \hat{a}_{\vec{R}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \in \text{B.Z.}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger. \quad (5)$$

Analoge Beziehungen gelten für $\hat{b}_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}$ und $\hat{b}_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}^\dagger$. Welchem Gitter gehören die reziproken Gittervektoren an und was ist die geometrische Form der 1. Brillouinzone (oben abkürzt als "B.Z.")?

- (c) Bringen Sie den Hamiltonoperator auf die Form

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \hat{\psi}^\dagger(\vec{k}) \mathcal{H}_0 \hat{\psi}(\vec{k}), \quad \mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & \phi(\vec{k}) \\ \phi^\dagger(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

wobei $\hat{\psi}(\vec{k}) = (\hat{a}_{\vec{k}} \hat{b}_{\vec{k}})^T$.

- (d) Bestimmen Sie die Dispersionsrelation $\varepsilon(\vec{k})$ von Graphen.
 (e) Das Spektrum $\varepsilon(\vec{k})$ hat zwei unabhängige Nullstellen in der 1. B.Z. bei $\vec{k} = \vec{K}_+ = 2\pi/3a(3^{-1/2}, 1)^T$ und $\vec{k} = \vec{K}_- = 2\pi/3a(-3^{-1/2}, 1)^T$, den sogenannten Dirac-Punkten. Betrachten Sie im Folgenden Energien $E \ll t$. Leiten Sie die effektive Niederenergie-theorie her, indem Sie den Hamiltonoperator (6) jeweils in der Nähe der Dirac-Punkte in führender Ordnung in $\vec{p} = \vec{k} - \vec{K}_\pm$ entwickeln. Prozesse zwischen den Dirac-Punkten werden dabei vernachlässigt. Zeigen Sie, dass der aus \mathcal{H}_0 resultierende effektive Operator \mathcal{H}_{eff} für einen der beiden Dirac-Punkte folgende Gestalt annimmt:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(\vec{p}) = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \quad (7)$$

wobei wir die Fermigeschwindigkeit $v_F = 3ta/2$ eingeführt haben.

Ende Bonusaufgabe

- (f) Bestimmen Sie mit Gl. (7) die (matrixwertige) Greensche Funktion $G(\varepsilon, \vec{p}) = [\varepsilon - \mathcal{H}_{\text{eff}}(\vec{p})]^{-1}$ von Graphen im Impulsraum. Zeigen Sie, dass die Greensche Funktion $G(\varepsilon, \vec{p})$ mit den Projektoren $P_{\pm, \vec{p}} = (1 \pm \vec{\sigma} \cdot \vec{p}/p)/2$ in die Form $G(\varepsilon, \vec{p}) = P_+ G_+(\varepsilon, p) + P_- G_-(\varepsilon, p)$ gebracht werden kann. Geben Sie $G_\pm(\varepsilon, p)$ an. Auf welche Unterräume projizieren die Operatoren P_\pm ?
 (g) Berechnen Sie aus der Greenschen Funktion die Zustandsdichte

$$\nu(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \text{Tr}[G^R(\varepsilon, \vec{p})]. \quad (8)$$

Bestimmen Sie daraus die Dichte $n(\mu) - n(0)$ in Abhängigkeit des chemischen Potentials μ , wobei $n(0)$ die Dichte bei halber Füllung ($\mu = 0$) ist. Zeichnen Sie das Feynman Diagramm für die Dichte.