

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2012/2013

Prof. Dr. J. Schmalian
Dr. P. Orth, Dr. S. V. Syzranov

Blatt 4
Besprechung 09.11.2012

1. Elektronen in 1D periodischem Potential (10 + 5 + 10 + 5 + 5 = 35 Punkte)

Wir betrachten Elektronen in einem eindimensionalen periodischen Potential der Form $V(x) = V_0 \cos^2(\pi x/a)$ mit Gitterkonstante a . Der Hamiltonian lautet $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$. Verwenden Sie den Ansatz der Bloch-Funktionen $\psi_{n,k}(x) = u_{n,k}(x) \exp(ikx)$ mit $u_{n,k}(x+a) = u_{n,k}(x)$ um das Energiespektrum $E_{n,k}$ (in Einheiten von $\hbar^2/2ma^2$) zu bestimmen.

(a) Starten Sie von der Schrödinger Gleichung

$$H\psi_{n,k}(x) = E_{n,k}\psi_{n,k}(x),$$

benutzen Sie die Periodizität von $u_{n,k}(x)$ und leiten Sie eine Matrix-Eigenwertgleichung für die Energien $E_{n,k}$ her. Geben Sie die Elemente der Matrix $H_{l,l'}(k)$ mit $l \in \mathbb{Z}$ explizit an (l bezeichnet die Fouriermoden).

(b) Zeigen Sie, dass die Eigenwerte die Relation $E_{n,k+G_l} = E_{n,k}$ mit $G_l = l2\pi/a$ erfüllen.

Im Folgenden wollen wir die Eigenwertgleichung für die Energien numerisch für einige k -Punkte lösen. Das können Sie per Hand oder auch mit dem Computer (z.B. Mathematica) erledigen. Wir beschränken uns im Folgenden auf $l \in \{-1, 0, 1\}$ so dass wir nur 3×3 Matrizen diagonalisieren müssen.

(c) Bestimmen Sie das Spektrum, d.h. die drei Energieeigenwerte $E_{l,k}$ mit $l \in \{-1, 0, 1\}$ für $V_0 = 10$ (in Einheiten von $\frac{\hbar^2}{2ma^2}$) und $k = \{0, \pm\frac{\pi}{3a}, \pm\frac{2\pi}{3a}, \pm\frac{\pi}{a}\}$. Interpolieren Sie zwischen den Punkten per Hand, um das Spektrum zu erhalten.

(d) Bestimmen Sie die Grösse der Energielücke Δ_{21} zwischen dem ersten und zweiten Band an der Stelle $k = \pi/a$ für $V_0/(\frac{\hbar^2}{2ma^2}) = \{1, 3, 6, 10\}$. Bestimmen Sie das funktionale Verhalten von $\Delta_{21}(V_0)$ als Funktion von V_0 . Warum finden Sie dieses Verhalten ?

(e) Bestimmen Sie die Grösse der Energielücke Δ_{32} zwischen dem zweiten und dritten Band an der Stelle $k = 0$ für $V_0/(\frac{\hbar^2}{2ma^2}) = \{1, 3, 6, 10\}$. Bestimmen Sie das funktionale Verhalten von $\Delta_{32}(V_0)$ als Funktion von V_0 . Warum finden Sie dieses Verhalten ?

2. Tight-binding Modell auf dem 2D Quadratgitter (5 + 10 + 15 = 30 Punkte)

In dieser Aufgabe berechnen wir das Spektrum von (spinlosen) Fermionen auf einem zweidimensionalen Quadratgitter mit Bravaisgittervektoren $\mathbf{a}_x = a(1, 0)$ and $\mathbf{a}_y = a(0, 1)$. Wir betrachten dabei sowohl das Hüpfen auf nächste Nachbarplätze mit Amplitude t und übernächste Nachbarplätze mit Amplitude t' . Der Hamiltonian lautet

$$H = \sum_{i_x=1}^{N_x} \sum_{i_y=1}^{N_y} \left\{ -t \left(c_{i_x+1, i_y}^\dagger c_{i_x, i_y} + c_{i_x, i_y+1}^\dagger c_{i_x, i_y} + \text{h.c.} \right) - t' \left(c_{i_x+1, i_y+1}^\dagger c_{i_x, i_y} + c_{i_x-1, i_y+1}^\dagger c_{i_x, i_y} + \text{h.c.} \right) \right\}$$

Der Operator c_{i_x, i_y}^\dagger erzeugt ein Fermion am Gitterplatz $\mathbf{x}_{i_x, i_y} = i_x \mathbf{a}_x + i_y \mathbf{a}_y$. Wir nehmen periodische Randbedingungen an mit $N_x(N_y)$ Gitterplätzen in der $x(y)$ -Richtung, d.h. $c_{i_x+N_x, i_y+N_y} = c_{i_x, i_y}$.

- (a) Bestimmen Sie die reziproken Gittervektoren \mathbf{G}_x und \mathbf{G}_y aus der Beziehung $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_j = 2\pi\delta_{ij}$ wobei $i, j \in \{1 \equiv x, 2 \equiv y\}$. Welche \mathbf{k} -Vektoren gehören zur ersten Brillouinzone (BZ). Zeichnen Sie die erste Brillouinzone.
- (b) Verwenden sie die Entwicklung

$$c_{i_x, i_y} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\mathbf{k} \in 1. \text{BZ}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_{i_x, i_y}},$$

um das Spektrum $E(\mathbf{k})$ in der ersten Brillouinzone zu berechnen. Bestimmen Sie auch die Bandbreite $W = [\min_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}), \max_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})]$.

- (c) Setzen Sie $t' = 0$ und bestimmen Sie die Fermi-Oberfläche für die Fermi Energien $E_F = \{-3t, 0, 3t\}$ für $t > 0$. Bestimmen Sie den Einfluss von $t' > 0$ auf die Fermi-Oberfläche für $E_F = 0$.

3. Peierls Instabilität in Polyacetylen

(15 + 15 + 5 = 35 Punkte)

Betrachten Sie einen Hamiltonian von spinlosen Fermionen auf einem 1D Gitter

$$H = -t(1 + \Delta) \sum_{j=1}^N (a_{j+1}^\dagger b_j + \text{h.c.}) - t(1 - \Delta) \sum_{j=1}^N (a_j^\dagger b_j + \text{h.c.}) + u\Delta^2,$$

mit $t, \Delta, u > 0$. Die Summe über j geht über die N Bravaisgitterpunkte. Der Bravaisgittervektor lautet $\mathbf{a} = a$ und in einer Einheitszelle befinden sich zwei Atome an den Orten $\boldsymbol{\delta}_a = 0$ und $\boldsymbol{\delta}_b = a/2$. Die Ortsvektoren der a -Gitterplätze lauten also $\mathbf{x}_j = j\mathbf{a} + \boldsymbol{\delta}_a$, die der b -Gitterplätze $\mathbf{x}_j = j\mathbf{a} + \boldsymbol{\delta}_b$ mit $j = 1, \dots, N$. Der Operator $a_j^\dagger (b_j^\dagger)$ erzeugt ein Fermion auf dem Basisplatz $a(b)$ der Einheitszelle j . Verwenden Sie periodische Randbedingungen $\mathbf{x}_{j+N} = \mathbf{x}_j$.

- (a) Berechnen Sie das Spektrum $E_{n,k}$ in der ersten Brillouinzone. Diskutieren Sie die beiden Grenzfälle $\Delta = 0$ und $\Delta = 1$.
- (b) Bestimmen Sie die Gesamtenergie des Systems bei $T = 0$ und halber Füllung, d.h. für N (spinlose) Fermionen im System. Dabei begegnen Sie dem vollständigen elliptischen Integral zweiter Art

$$E(1 - \Delta^2) = \frac{1}{4} \int_{-\pi}^{\pi} dk \sqrt{1 - (1 - \Delta^2) \sin^2 \frac{k}{2}}.$$

- (c) Entwickelt man die elliptische Funktion für kleine Δ^2 ergibt sich $E(1 - \Delta^2) = 1 + \Delta^2(a - b \log \Delta^2) + \mathcal{O}(\Delta^4 \log \Delta^2)$ mit Konstanten $a = 0.44$ und $b = 0.25$. Benutzen Sie diese Taylorentwicklung um den Wert von Δ zu bestimmen der die Energie im System minimiert. Ist dieser Wert ungleich Null, und was bedeutet das ?