

## Theorie der Kondensierten Materie I WS 2017/2018

Prof. Dr. A. Mirlin, PD Dr. I. Gornyi  
Dr. N. Kainaris, Dr. S. Rex, J. KlierBlatt 10  
Besprechung 11.01.2018

## 1. Coulomb Wechselwirkung in Graphen: (6+10+14=30 Punkte)

Auf Übungsblatt 4 haben Sie schon gelernt, dass der Hamilton-Operator in Graphen in der Nähe des Dirac-Punktes als eine  $2 \times 2$  Matrix dargestellt wird

$$\mathcal{H} = v \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}.$$

Dieses Verhalten ist korrekt für Impulse  $|\mathbf{p}| < \Lambda$ , wobei  $\Lambda$  ein cut-off Impuls ist ( $\Lambda \sim 1/a$ , wobei  $a$  die Gitterkonstante ist). Das Energie-Spektrum ist dann linear  $E_{\mathbf{p}} = \pm v|\mathbf{p}|$ .

## (a) Dielektrizitätskonstante in Graphen.

Betrachten Sie eine einzelne Graphen-Schicht zwischen zwei Isolatoren mit Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon_1$  bzw.  $\epsilon_2$ . Betrachten Sie die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen in Graphen. Zeigen Sie mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen und Randbedingungen für das elektrische Feld an Grenzflächen, dass die Coulomb-Wechselwirkung von der Form

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

ist. Hier haben wir Gaußsche Einheiten verwendet. Bestimmen Sie  $\epsilon$  als Funktion von  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$ .

## (b) Coulomb-Matrixelemente.

Betrachten Sie den Hamiltonian der Coulomb-Wechselwirkung von der Form

$$V = \frac{e^2}{2\epsilon} \sum_{\sigma, \sigma' = \{\uparrow, \downarrow\}} \sum_{\tau, \tau' = \{K, K'\}} \int d^2\mathbf{x} d^2\mathbf{y} \frac{\rho_{\sigma\tau}(\mathbf{x}) \rho_{\sigma'\tau'}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

mit Dichteoperator  $\rho_{\sigma\tau}(\mathbf{x}) = \psi_{\sigma\tau}^\dagger(\mathbf{x}) \psi_{\sigma\tau}(\mathbf{x})$ . Hier bezeichnet  $\sigma$  den elektronischen Spin und  $\tau$  den Valley-Pseudospin. Die Dielektrizitätskonstante  $\epsilon$  ist wie in Aufgabe 1a berechnet eine Funktion von  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$ , den Dielektrizitätskonstanten der beiden Medien, die die Graphen-Schicht einschließen. Finden Sie die Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung in der Eigenbasis des Hamilton-Operators.

## (c) Hartree-Fock Näherung.

Betrachten Sie die Coulomb-Wechselwirkung in der Hartree-Fock Näherung und berechnen Sie die Korrektur zur Energie des Grundzustandes des Systems. Zeigen Sie, dass die Energie der Elektronen mit der Hartree-Fock Korrektur von der Form

$$E_{\mathbf{p}}^{HF} = \pm v(p)|\mathbf{p}|, \quad v(p) = v \left( 1 + A \frac{e^2}{\hbar v \epsilon} \ln \frac{\Lambda}{|\mathbf{p}|} \right)$$

ist, wobei  $A$  eine Konstante ist. Bestimmen Sie  $A$ .

## 2. Spindichtewellen Instabilität:

(12+8=20 Punkte)

Betrachten Sie das Hubbard-Modell für Elektronen auf einem zweidimensionalen quadratischen Gitter, welches durch den folgenden Hamilton-Operator definiert ist

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1)$$

Der Operator  $c_{i\sigma}^{\dagger}$  erzeugt ein Fermion mit Spin  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$  am Gitterplatz  $i = (i_1, i_2)$ , wobei  $i_{1,2} \in \mathbb{N}$  und  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ . Die Summe läuft über nächste Nachbarn  $\langle i, j \rangle$  im zweidimensionalen quadratischen Gitter mit den Basisvektoren des Bravais-Gitters,  $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$  und  $\mathbf{a}_2 = a(0, 1)$ . Nehmen Sie an, dass die Amplitude des Hüpfens positiv ist,  $t > 0$  und dass die on-site Wechselwirkung repulsiv ist,  $U \geq 0$ .

- (a) Betrachten Sie den Fall  $U > 0$  und nutzen Sie die Hartree-Fock Näherung um einen quadratischen Molekularfeld-Hamilton-Operator  $H_{HF}$  zu erhalten.
- (b) Betrachten Sie das System bei halber Füllung, d.h. im Mittel ist jeder Gitterplatz mit einem Elektron besetzt. Bestimmen Sie das Energiespektrum des resultierenden Molekularfeld-Hamilton-Operators  $H_{HF}$ .

(c) **5 Bonuspunkte**

Betrachten Sie nun das System bei halber Füllung und Temperatur  $T = 0$ . Definieren Sie den Ordnungsparameter des Molekularfelds mit (antiferromagnetischer Spindichtewellen-Kanal)

$$\langle n_{(i_1, i_2), \uparrow} \rangle = n + (-1)^{i_1 + i_2} m; \quad \langle n_{(i_1, i_2), \downarrow} \rangle = n - (-1)^{i_1 + i_2} m.$$

Leiten Sie durch Minimierung der freien Energie eine selbstkonsistente Gleichung für die Spindichtewellenamplitude  $m$  her:

$$\frac{\partial}{\partial m} \langle H_{HF} - \mu N \rangle_{T=0} = 0,$$

wobei  $N = \sum_{j,\sigma} n_{j,\sigma}$  die Anzahl der Teilchen im System beschreibt, welche durch das chemische Potential  $\mu$  bestimmt ist. Nutzen Sie  $\mu = Un$  um sicherzustellen, dass sich das System bei halber Füllung befindet.

(d) **10 Bonuspunkte**

Lösen Sie die resultierende Gleichung für die Anregungslücke  $\Delta = Um$  zu logarithmischer Genauigkeit [nutzen Sie dazu den Ausdruck  $\rho(\epsilon) = 1/2\pi^2 t \ln(16t/\epsilon)$  für die Zustandsdichte und lösen Sie das Integral indem Sie nur den führenden Term in der asymptotischen Entwicklung für  $\Delta \rightarrow 0$  behalten].

## 3. Bonusaufgabe: Fermionische Kette.

(20 Bonuspunkte)

Der Hamilton-Operator einer ein-dimensionalen fermionischen Kette lautet

$$\hat{H}_0 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[ t \left( \hat{a}_n^{\dagger} \hat{a}_{n+1} + \hat{a}_{n+1}^{\dagger} \hat{a}_n \right) - 2U \hat{a}_n^{\dagger} \hat{a}_n \right].$$

Führen Sie zunächst eine Fourier-Transformation

$$\hat{a}_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikn} \hat{a}_k$$

durch. Damit zeigen Sie, dass  $\hat{H}_0 = \sum_k \epsilon(k) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$  gilt mit  $\epsilon(k) = 2(t \cos k - U)$ .

Bestimmen Sie nun das Spektrum  $\epsilon(k)$  des Hamilton-Operators  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , wobei

$$\hat{V} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta \left( \hat{a}_n \hat{a}_{n+1} + \hat{a}_{n+1}^\dagger \hat{a}_n^\dagger \right).$$

**Ein frohes Weihnachtsfest, Glück und Erfolg im Neuen Jahr!**