

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie II SS 13

PROF. A. MIRLIN

Blatt 4

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

Besprechung 10.05.13

1. Longitudinale Phononen und der Phonon-Propagator (20 Punkte)

Als einfachstes Modell für Phononen (Gitterschwingungen) im Kristallgitter betrachten wir longitudinale Schallwellen in einem isotropen, homogenen Medium. Die klassische Lagrange-Funktion der Phononen ist gegeben durch

$$L_0 = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{L}_0(\mathbf{r}), \quad \mathcal{L}_0(\mathbf{r}) = \frac{\rho_0}{2} \left[(\partial_t \vec{q})^2 - c^2 (\nabla \cdot \vec{q})^2 \right], \quad (1)$$

wobei $\vec{q}(\mathbf{r}, t)$ die Auslenkung des Mediums von der Ruhelage am Punkt \mathbf{r} beschreibt. Die Konstanten ρ_0 und c bezeichnen die mittlere Dichte des Mediums und die Schallgeschwindigkeit.

- (a) Motivieren Sie die Form der Lagrangedichte (1), insbesondere des Terms proportional zu $(\nabla \vec{q})^2$ für ein einfaches Modell gekoppelter harmonischer Oszillatoren in 1D.

Schreiben Sie die Lagrangedichte (1) im Impulsraum für die Fouriertransformierte $\vec{q}(\mathbf{k}, t)$. Zerlegen Sie das Feld $\vec{q}(\mathbf{k}, t)$ in einen Anteil parallel, im Folgenden als $q(\mathbf{k}, t)$ bezeichnet, und senkrecht zu \vec{k} . Zeigen Sie, dass die beiden Komponenten entkoppeln. Zeigen Sie, dass die Lagrangedichte $\mathcal{L}[q(\mathbf{r}, t)]$ für das Feld $q(\mathbf{r}, t)$, welches die longitudinalen Phonon-Moden beschreibt, folgende Form hat:

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}) = \frac{\rho_0}{2} \left[(\partial_t q)^2 - c^2 (\nabla q)^2 \right]. \quad (2)$$

- (b) Stellen Sie die klassische Bewegungsgleichung für das Feld $q(\mathbf{r}, t)$ auf.

Hinweis: Zeigen Sie, dass die Euler-Lagrange-Gleichung einer klassischen Feldtheorie folgende Form hat:

$$\partial_t \frac{\delta \mathcal{L}(\mathbf{r}, t)}{\delta (\partial_t q(\mathbf{r}, t))} + \nabla \cdot \frac{\delta \mathcal{L}(\mathbf{r}, t)}{\delta (\nabla q(\mathbf{r}, t))} - \frac{\delta \mathcal{L}(\mathbf{r}, t)}{\delta q(\mathbf{r}, t)} = 0.$$

- (c) Lösen Sie die klassische Bewegungsgleichung durch Fouriertransformationen im Raum und in der Zeit. Zeigen Sie, dass die Schallwellen der linearen Dispersion $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ genügen.
- (d) Berechnen Sie das zum Feld $q(\mathbf{r}, t)$ kanonisch konjugierte "Impulsfeld"

$$p(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta (\partial_t q(\mathbf{r}, t))}.$$

Welcher physikalischen Größe entspricht dieses Feld?

- (e) Bestimmen Sie die Hamilton-Funktion des klassischen Systems. Zeigen Sie, dass sich diese als eine Summe über Moden \mathbf{k} darstellen lässt, welche jeweils einem harmonischen Oszillator mit Frequenz $\omega_{\mathbf{k}}$ entsprechen.

Es gilt nun, diese Schallwellen zu quantisieren. Die klassischen Felder $q(\mathbf{r}, t)$ und $p(\mathbf{r}, t)$ werden hierbei durch Operatoren ersetzt, die der kanonischen Vertauschungsregel

$$[\hat{q}(\mathbf{r}, t), \hat{p}(\mathbf{r}', t)] = i\hbar\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3)$$

genügen. Im Folgenden sei $\hbar = 1$. Die Quantisierung lässt sich technisch bewerkstelligen, indem die Quantenfelder $\hat{q}(\mathbf{r}, t)$ und $\hat{p}(\mathbf{r}, t)$ durch geeignete Kombinationen von bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren dargestellt werden.

- (f) Begründen Sie: Müssen die Operatoren \hat{q} und \hat{p} hermite'sch sein?
 (g) In Analogie an die Quantisierung des linearen harmonischen Oszillators wählt man den folgenden Ansatz für $\hat{q}(\mathbf{r}, t)$ in Heisenberg-Darstellung:

$$\hat{q}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \left[b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}}t} + b_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}}t} \right].$$

Inwiefern besteht eine Analogie zum harmonischen Oszillator? Wodurch ist diese Analogie gerechtfertigt? Bestimmen Sie die Koeffizienten $A_{\mathbf{k}}$.

Hinweis: Verwenden Sie Ihr Ergebnis aus Teil (1d) sowie den Kommutator (3).

- (h) Drücken Sie den Hamilton-Operator des quantisierten Systems durch $b_{\mathbf{k}}$ und $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ aus.
 (i) Überzeugen Sie sich mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung $\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \rho_0 \nabla \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = 0$, dass das Phononfeld, üblicherweise durch

$$\hat{\varphi}(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{\mathbf{k}} i \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2V}} \left[b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}}t} - b_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}}t} \right] \quad (4)$$

dargestellt, proportional zur Abweichung der Dichte $\rho(\mathbf{r}, t)$ von der mittleren Dichte ρ_0 des Mediums ist und geben Sie die Proportionalitätskonstante an.

- (j) Überlegen Sie sich, welche Form die Lagrangedichte der Wechselwirkung des Phononfeldes $\hat{\varphi}(\mathbf{r}, t)$ mit dem Feld der Elektronen $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ in einem Metall hat.

Die Greensche Funktion eines unter Raum- und Zeittranslationen invarianten Systems nicht wechselwirkender Phononen ist definiert durch

$$D(\mathbf{r}, t) = -i \langle \Phi_0 | T \hat{\varphi}(\mathbf{r}, t) \hat{\varphi}(\mathbf{0}, 0) | \Phi_0 \rangle, \quad (5)$$

wobei T das chronologische Produkt ("latest to the left") und $\hat{\varphi}(\mathbf{r}, t)$ das in (4) definierte Phononfeld bezeichnet.

- (k) Welche der bosonischen Phononenzustände sind im Grundzustand $|\Phi_0\rangle$ bei Temperatur $T=0$ besetzt?
 (l) Berechnen Sie die Fouriertransformierte $D(\mathbf{k}, \omega)$ durch explizites Einsetzen der Phononfelder.

2. Der Heisenberg-Magnet und Jordan-Wigner-Transformation (12 Punkte)

Der eindimensionale Heisenberg-Magnet mit nächster-Nachbar-Kopplung wird durch den Hamilton-Operator

$$H = - \sum_{j=1}^N (J_x S_j^x S_{j+1}^x + J_y S_j^y S_{j+1}^y + J_z S_j^z S_{j+1}^z) \quad (6)$$

beschrieben. Wir berechnen das Anregungsspektrum, indem wir die Spinoperatoren durch fermionische Operatoren ausdrücken.

Ein lokalisierter Elektronspin lässt sich durch einen unbesetzten oder einfach besetzten Fermionenzustand darstellen:

$$|\uparrow\rangle \equiv c^\dagger |0\rangle, \quad |\downarrow\rangle \equiv |0\rangle.$$

Für die Spinoperatoren ergibt sich

$$S^+ = S^x + iS^y = c^\dagger, \quad S^- = S^x - iS^y = c, \quad S^z = c^\dagger c - \frac{1}{2}. \quad (7)$$

- a) Überzeugen Sie sich, dass die in (7) definierten Spinoperatoren der SU(2)-Spinalgebra $[S^a, S^b] = i\epsilon^{abc}S^c$ genügen.

Das Problem mit dieser Darstellung ist, dass die Fermion-Operatoren auf verschiedenen Gitterplätzen j Antikommutationsregeln genügen, die Spinoperatoren jedoch kommutieren müssten. Um dieses Problem zu umgehen, führten Jordan und Wigner sogenannte *String-Operatoren* ein ($n_i = c_i^\dagger c_i$):

$$S_j^+ = c_j^\dagger \exp\left(-i\pi \sum_{i<j} n_i\right), \quad S_j^- = c_j \exp\left(i\pi \sum_{i<j} n_i\right), \quad S_j^z = c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2}.$$

- b) Zeigen Sie, dass die Spinoperatoren auf verschiedenen Gitterplätzen j und k nun vertauschen, d.h. $[S_j^\pm, S_k^\pm] = 0$. Überlegen Sie sich außerdem wie dieser String-Operator funktioniert und wann eine solche Konstruktion möglich ist. *Hinweis: Berechnen Sie zunächst $\{e^{i\pi n_j}, c_j^\dagger\}$*
- c) Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator (6) mit Hilfe einer Jordan-Wigner-Transformation in der Form

$$H = - \sum_{j=1}^N \left\{ t(c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) - \Delta(c_j c_{j+1} + h.c.) + J_z \left(n_j - \frac{1}{2}\right) \left(n_{j+1} - \frac{1}{2}\right) \right\}$$

geschrieben werden kann, wobei "h.c." das hermite'sch Konjugierte des vorhergehenden Terms bedeutet und geben Sie t und Δ an.

- d) Betrachten Sie im Folgenden den Spezialfall $J_z = 0$ des magnetischen Modells (auch XY-Modell genannt).

In fermionischer Formulierung entspricht dieses Modell der Kitaev Kette (Übungsblatt 2 Aufgabe 2). Sie kennen also schon die Lösung des Problems.

- Welche Bedeutung kommt den Anregungsenergien im magnetischen Problem zu? Gehen Sie insbesondere auf die Spezialfälle $J_x = J_y$ und $J_y = 0$ ein.
- Welche topologischen Phasen des Kitaev Modells lassen sich im XY-Modell realisieren?
- Die topologisch nichttriviale Phase des Kitaev Modells ist gekennzeichnet durch am Rand lokalisierte Majoranaanregungen. Auf Grund der erhaltenen Fermionparität gibt es einen zweifach (nahezu) entarteten Grundzustand: Entweder beide Majoranzustände sind besetzt oder beide sind leer. Was ist die physikalische Bedeutung im magnetischen Problem?