

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 2×2 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 Λ 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 ϵ_1 bzw. ϵ_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 Gaussche Einheiten verwendet. Bestimmen Sie ϵ als Funktion von ϵ_1 und ϵ_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 σ den elektronischen Spin und τ den Valley-Pseudospin. Die Dielektrizitätskonstante ϵ ist wie in Aufgabe 1a berechnet eine Funktion von ϵ_1 und ϵ_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 μ 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!