◯ Aufgabe 27: Tight-Binding-Modell I: Periodische Randbedingungen

Das Tight-Binding-Modell ist ein einfaches und nützliches Modell um freie Elektronen im Festkörper zu beschreiben. Wir betrachten hier ein Tight-Binding-Modell für eine eindimensionale Kette mit $N = 2 + 4n$ ($n \in \mathbb{N}_0$) Plätzen und periodischen Randbedingungen. Die Plätze befinden sich an den Orten $x_j = a \cdot j$ mit $j = 0, \ldots, N-1$ und der Gitterkonstanten a. Der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung lautet

$$H = -t \sum_{j\sigma} \left(c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + h.c. \right), \tag{1}$$

wobei die Summe über alle Gitterplätze j, sowie die beiden Spinrichtungen $\sigma =\uparrow, \downarrow$ ausgeführt wird. $c_{j,\sigma}^{(\dagger)}$ vernichtet (erzeugt) dabei ein Teilchen mit Spin σ auf dem Platz j.

(a) Zeigen Sie, dass sich der Hamiltonoperator auf Diagonalform

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon(k) b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} \tag{2}$$

bringen lässt, indem man eine diskrete Fourier-Transformation durchführt und die Vernichter und Erzeuger durch die entsprechenden Operatoren im k-Raum $b_{k,\sigma}^\dagger$, $b_{k,\sigma}$ ersetzt:

$$c_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \mathrm{e}^{-ikx_j} b_{k,\sigma}. \tag{3}$$

Wie lautet $\varepsilon(k)$?

(b) Zeichnen Sie die Dispersionsrelation $\varepsilon(k)$ innerhalb der 1. Brillouin-Zone für $N \to \infty$.

(c) Geben Sie den Grundzustand für N Fermionen an, wobei jeweils $N/2$ mit $\sigma =\uparrow$ und $\downarrow$. Bis zu welcher Energie ist das Band gefüllt? Geben Sie die Fermieenergie an.

(d) Für Bosonen unterdrücken wir den Index σ und ersetzen die fermionischen Operatoren durch bosonische. Wie lautet der Grundzustand des Tight-Binding-Modells für M ($M \in \mathbb{N}$) Bosonen?

◯ Aufgabe 28: Tight-Binding-Modell II: Offene Randbedingungen

Wir betrachten erneut das Tight-Binding Modell

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (c^\dagger_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + c^\dagger_{j,\sigma} c_{i,\sigma}) \tag{4}$$

worin $c^{(\dagger)}_{i\sigma}$ ein Elektron auf dem Gitterplatz i mit Spinprojektion σ vernichtet (erzeugt) und $\langle i, j \rangle$ nächste Nachbarplätze bezeichnet. Normalerweise werden periodische Randbedingungen angenommen, welche zu ebenen Wellen als Einteilcheneigenfunktionen führen, sodass der Hamiltonoperator mittels Fouriertransformation diagonalisiert werden kann (siehe Aufg. 27). Hier soll eine endliche, eindimensionale Kette mit N Gitterplätzen und **offenen** Randbedingungen, also

$$H = t \sum_\sigma \sum_{i=1}^{N-1} (c^\dagger_{i,\sigma} c_{i+1,\sigma} + c^\dagger_{i+1,\sigma} c_{i,\sigma}) \tag{5}$$

betrachtet werden.

(a) Geben Sie die Eigenfunktionen $\varphi_\ell(x) = \langle x|\ell\rangle$ und Eigenenergien E_ℓ eines unendlich hohen Potentialtopfs mit Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \le x \le L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \tag{6}$$

an.

(b) Argumentieren Sie ausgehend von den Erzeugungsoperatoren $d^\dagger_\ell$ der Moden $|k_\ell\rangle$ mit

$$|k_\ell\rangle = d^\dagger_\ell |0\rangle \,, \tag{7}$$

dass die Feldoperatoren im unendlich hohen Potentialtopf folgende Form besitzen

$$\hat\psi^\dagger(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{\ell=1}^{N} \sin(k_\ell x) d^\dagger_\ell. \tag{8}$$

Wie übersetzen sich die Anschlussbedingungen im unendlich hohen Potentialtopf in Eigenschaften der Feldoperatoren? Geben Sie k_ℓ explizit an.

(c) Wie hängen der unendlich hohe Potentialtopf und die endliche Kette zusammen? Geben Sie die Feldoperatoren $c^\dagger_{i,\sigma}$ für die endliche Kette aus N Plätzen mit Gitterkonstante 1 für spinbehafteten Teilchen an.

(d) Transformieren Sie den Hamiltonoperator (5) auf die Erzeugungsoperatoren der Moden $d^\dagger_\ell$. Sie können bei der Vereinfachung der Summe Σ über die Plätze folgendermaßen vorgehen:

1. Schreiben Sie $\Sigma = \Sigma/2 + \Sigma/2$ und verschieben Sie in einer der beiden Summen die Summation $i \to -i - 1$.
2. Fügen Sie Terme, welche aufgrund der offenen Randbedingungen wegfallen, künstlich hinzu („+0“). Das Ziel ist eine Summe über $i \in [-(N + 1), N]$.
3. Verschieben Sie die Summation nun auf $i \to i + (N + 1)$.

4. Schreiben Sie die Summanden in Exponentialfunktionen aus und nutzen Sie die Orthogonalitätsrelation

$$\frac{1}{N+1}\sum_{m=0}^{N} \exp\left(\pm\,\mathrm{i}\,2\pi \frac{n}{N+1} m\right) = \delta_{n,0}, \tag{9}$$

welche aus der (ungenäherten) geometrischen Reihe folgt. Beweisen Sie die Orthogonalitätsrelation (9).

Das Ergebnis dieser Prozedur lautet

$$H = t \sum_{\sigma} \sum_{\ell=1}^{N} 2\cos(k_\ell) n_{\ell,\sigma} \tag{10}$$

mit $n_{\ell,\sigma} = d^\dagger_{\ell,\sigma} d_{\ell,\sigma}$.

(e) Da es sich um freie Teilchen handelt, ist der Grundzustand bei gegebener Anzahl Teilchen pro Spin N_σ die sukzessive Füllung der Einteilchenzustände niedrigster Energie. Man kann ihn also als Produkt von Erzeugungsoperatoren $d^\dagger_{\ell,\sigma}$ angewandt auf den Vakuumzustand schreiben. Geben Sie den Grundzustand für Fermionen mit Spin 1/2 an. Achten Sie darauf, dass das Minimum der Dispersionsrelation **nicht** bei $k_\ell = 0$ ist.

(f) Geben Sie die Grundzustandsenergie des nicht-wechselwirkenden Vielteilchensystems an. Die Summe über die Moden muss nicht vereinfacht werden.

Weitere Observablen, wie die Dichte oder die Dichte-Dichte Korrelationsfunktion können [1] entnommen werden.

[1] U. Busch und K. A. Penson, „Tight-binding electrons on open chains: Density distribution and correlations“, Phys. Rev. B **36**, 9271 (1987).