
4. Plenum zur Quantentheorie II

Wintersemester 2014/2015

PLENUM: Donnerstag, 22.01.2015.

Das fermionische Hubbardmodell in einer Dimension: Hubbardringe

Das prototypische Modell zur Beschreibung von elektronischen Korrelationsphänomenen (beispielsweise für den Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang¹) ist das fermionische Hubbardmodell. In seiner einfachsten Form (eindimensionales Gitter, periodische Randbedingungen, rein lokale Elektron-Elektron-Wechselwirkung) lautet sein Hamiltonoperator²:

$$H = H_0 + H_1 = -t \sum_{j\sigma} (a_{j,\sigma}^\dagger a_{\text{mod}[j,M]+1,\sigma} + a_{\text{mod}[j,M]+1,\sigma} a_{j,\sigma}^\dagger) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

Die Operatoren $a_{j\sigma}^\dagger/a_{j\sigma}$ stellen hierbei die Erzeugungs-/Vernichtungsoperatoren eines Elektrons mit dem Spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ auf dem Gitterplatz j und die $n_{j\sigma} = a_{j\sigma}^\dagger a_{j\sigma}$ die zugehörigen Dichteoperatoren dar. mod bezeichnet die Modulofunktion und implementiert periodische Randbedingungen. $j = 0, \dots, M-1$ zählt die M Gitterplätze, deren Abstand hier $l = 1$ betragen soll. Berechnen Sie für $M = 4$ die Energie und die Entartung des Grundzustands des Systems

- im Fall, dass das System nur *ein* Elektron hat mit $t, U > 0$.
- im Fall, dass das System *vier* Elektronen hat, aber $U = 0, t > 0$ (unkorreliertes System).
- im Fall, dass das System *vier* (halbe Füllung), *fünf* bzw. *acht* (volle Füllung) Elektronen hat, aber $t = 0, U > 0$ (atomarer Limes).
- Berechnen Sie für alle obigen Fälle den Erwartungswert des sogenannten Doppelbesetzungsoperators $n_d = \frac{1}{M} \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$ (mittlere doppelte Besetzung pro Gitterplatz) im Grundzustand.
- Wie ändern sich obige Ergebnisse, wenn $U < 0$ (attraktives Hubbardmodell)? Gibt es einen physikalischen Grund, warum die Wechselwirkung zweier Elektronen anziehend werden kann?
- Warum könnte der obige (repulsive) Hamiltonoperator das Potential haben, einen Metall-Isolator-Übergang zu beschreiben?

¹Für eine Einführung siehe: J. Sólyom, "Fundamentals of the Physics of Solids", Band 3, Kapitel 25 (Springer 2010). Zum Schicksal des Mott Metall-Isolator-Übergangs in zweidimensionalen Hubbardmodellen siehe: Thomas Schäfer, Georg Rohringer, Karsten Held, Alessandro Toschi et al., arXiv:1405.7250

²Zur weiterführenden Betrachtung von Hubbardringen siehe: Angelo Valli, Thomas Schäfer, Georg Rohringer, Karsten Held, Alessandro Toschi et al., arXiv:1410.4733