
5. Plenum zur Quantentheorie II

Wintersemester 2017/2018

PLENUM: Montag, 15.01.2018.

Hubbard-Modell mit nächst-Nachbar Wechselwirkung

Betrachten Sie das folgende Modell für zwei Elektronen auf zwei Gitterplätzen:

$$H = H_0 - t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma}) + U \sum_{i=1,2} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V (n_{1\uparrow} + n_{1\downarrow})(n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow})$$

wobei $c_{i\sigma}^{(\dagger)}$ die Erzeugungs-/Vernichtungsoperatoren eines Elektrons mit Spin σ am Gitterplatz i sind, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ der Besetzungszahl-Operator ist und $H_0 = \epsilon_0 \sum_{i=1,2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$. Dies entspricht auch einem H_2 -Molekül, wobei im Hamilton-Operator ein zusätzlicher Wechselwirkungsterm $V = \int d^3r \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_0^*(\vec{r}' - \vec{R}_1) \psi_0^*(\vec{r} - \vec{R}_2) \psi_0(\vec{r} - \vec{R}_2) \psi_0(\vec{r}' - \vec{R}_1)$ zwischen Elektronen auf verschiedenen H -Atomen mitgenommen wird.

- Zeigen Sie, dass Gesamtspin und Gesamtspin in z -Richtung Erhaltungsgrößen sind, d.h. $[H, \vec{S}^2] = 0$ und $[H, S_z] = 0$. Was folgt daraus für die mögliche Eigenbasis von H ?
- Geben Sie alle möglichen Basis-Zustände für zwei Elektronen in zweiter Quantisierung und Besetzungszahldarstellung an. Wählen Sie die Basis so, dass die Basis-Zustände Eigenzustände des S_z -Operators sind.
- Geben Sie, in der von Ihnen gewählten Basis, die Matrixelemente des Hamilton-Operators an. Was kann man über die Struktur der Hamilton-Matrix sagen?
- Finden Sie jetzt die Energieeigenzustände. Um die Eigenzustände im Unterraum mit $S_z = 0$ zu finden, benutzen Sie den Fakt, dass H auch mit dem Gesamtspin-Operator kommutiert. Was ist der Grundzustand?

Hinweis: Zeigen Sie zuerst, dass $\frac{1}{\sqrt{2}}(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger)|vac\rangle$ ein Eigenzustand sowohl des Hamilton-Operators als auch des Gesamtspin-Operators mit $S = 1$ ist (Triplettzustand).