Technische Universität Wien

PD Dr. J. Tomczak, Prof. A. Toschi, Prof. K. Held

4. Übung zur Quantentheorie II

Wintersemester 2019/2020

PLENUM: Donnerstag, 16.01.2019.

1. Basiswechsel in zweiter Quantisierung

Seien $c_\alpha^\dagger$ und c_α die Erzeugungs-/Vernichtungsoperatoren in einer bestimmten Einteilchen- ON-Basis $\{|\varphi_\alpha\rangle\}$, so hat man in Besetzungszahldarstellung $c_\alpha^\dagger|0\rangle \equiv |0,\ldots,0, \underbrace{1}_{\text{Zustand }\alpha},0,\ldots,0\rangle$. Ein beliebiger Einteilchenoperator $F^{(1)}$ kann in zweiter Quantisierung folgendermaßen dargestellt werden:

$$F^{(1)} = \sum_{\alpha\alpha'} f^{(1)}_{\alpha'\alpha} c^\dagger_{\alpha'} c_\alpha \quad \text{mit} \quad f^{(1)}_{\alpha'\alpha} = \langle\varphi_{\alpha'}|f^{(1)}|\varphi_\alpha\rangle,$$

wobei $f^{(1)}$ ein beliebiger, im Einteilchen-Hilbertraum wirkender, Operator ist. Wir betrachten einen Basiswechsel zu einer anderen Einteilchen-ON-Basis $\{|\tilde\varphi_\beta\rangle\}$. Die Erzeugungs-/Vernichtungs-operatoren $\tilde c_\beta^\dagger$ und $\tilde c_\beta$ in der neuen Basis sind dann durch

$$\tilde c_\beta^\dagger = \sum_\alpha \langle\varphi_\alpha|\tilde\varphi_\beta\rangle c_\alpha^\dagger \quad \text{und} \quad \tilde c_\beta = \sum_\alpha \langle\tilde\varphi_\beta|\varphi_\alpha\rangle c_\alpha \tag{1}$$

gegeben.

a) Finden Sie für Fermionen mit Hilfe von Glg. (1) den Ausdruck für $F^{(1)}$ in der neuen Basis.

Weiteres kann man zeigen, dass $\tilde c_\beta^\dagger$, $\tilde c_\beta$ die gleichen Kommutationsrelationen erfüllen.

2. Fermionisches Hubbardmodell in einer Dimension: Benzen-Ring

Das prototypische Modell zur Beschreibung von elektronischen Korrelationsphänomenen ist das fermionische Hubbardmodell. In seiner einfachsten Form (eindimensionales Gitter, periodische Randbedingungen, rein lokale Elektron-Elektron-Wechselwirkung) lautet sein Hamiltonoperator:

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

Die Operatoren $c^\dagger_{j\sigma}/c_{j\sigma}$ stellen hierbei die Erzeugungs-/Vernichtungsoperatoren eines Elektrons mit dem Spin $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$ auf dem Gitterplatz j und die $n_{j\sigma} = c^\dagger_{j\sigma} c_{j\sigma}$ die zugehörigen Dichteoperatoren dar. mod bezeichnet die Modulofunktion und implementiert periodische Randbedingungen. $j = 0, ..., M-1$ zählt die M Gitterplätze, deren Abstand hier $l = 1$ betragen soll.

Berechnen Sie für $M = 6$ die Energie und die Entartung des Grundzustands des Systems

a) im Fall, dass das System nur *ein* Elektron hat mit $t, U > 0$.

b) im Fall, dass das System *sechs* Elektronen hat, aber $U = 0, t > 0$ (unkorreliertes System).

c) im Fall, dass das System *sechs* (halbe Füllung) Elektronen hat, aber $t = 0, U > 0$ (atomarer Limes).

d) Berechnen Sie für $t = 0, U > 0$ und *sechs* Elektronen auch die Energie des ersten angeregten Zustands und seine Entartung.

e) Wir verbleiben bei dem Fall $t = 0, U > 0$, *sechs* Elektronen und betrachten jetzt die Wechselwirkung mit Licht, beispielsweise in einer Solarzelle. Das Elektromagnetisches Feld kann man in einer geeigneten Eichung wie ein modifiziertes t beschreiben. Einfachheitshalber nehmen wir an $t \to t\cos(\omega\tau)$, wobei τ jetzt die Zeit ist und ω die Photon-Frequenz. Weiteres nehmen wir an, dass sich das System zunächst im Zustand $c^\dagger_{0\downarrow}c^\dagger_{1\uparrow}c^\dagger_{2\uparrow}c^\dagger_{3\uparrow}c^\dagger_{4\uparrow}c^\dagger_{5\uparrow}|0\rangle$ befindet. Berechnen Sie mit Hilfe von Fermis Goldener Regel die möglichen Endzustände und Übergangsraten.