

Fermionische Modelle: tight-binding - Elektronen, Hubbard - Modell

Bisher: Spinmodelle, d.h. Modelle mit **lokalisierten Spin-Freiheitsgraden**, z.B. „↑“ oder „↓“.

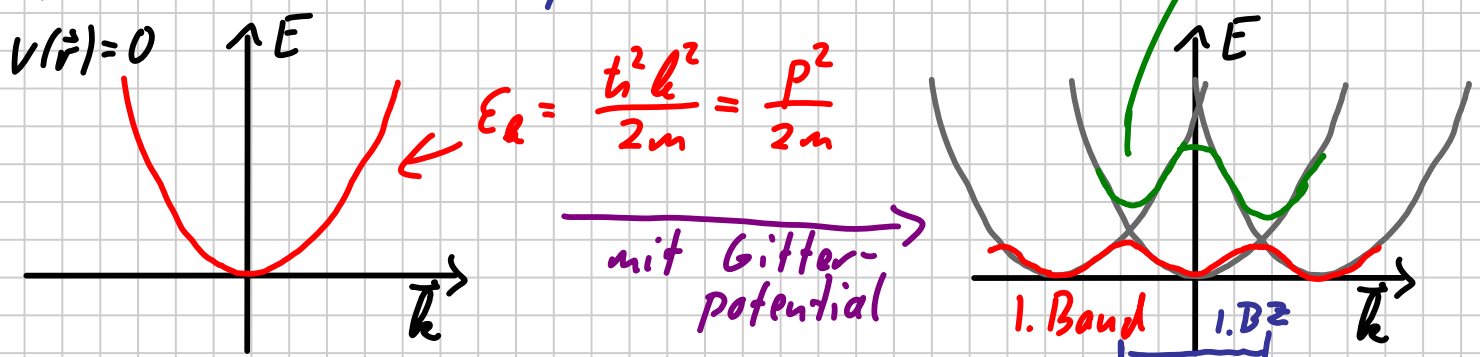
Geeignet als effektive oder phänomenologische Modelle für (i) Ferro- + Antiferromagnetismus bzw. allgemeiner (ii) kritische Phänomene.

Aber: wichtigste Wechselwirkung im Festkörper ist die elektrostatische Wechselwirkung, die an **Ladungsfreiheitsgrade** koppelt. Außerdem sind die Valenzelektronen z.B. in Metallen **delokalisiert**.

Eine mikroskopische Beschreibung der elektronischen Eigenschaften von Festkörpern erfordert also andere, allgemeinere Modelle.

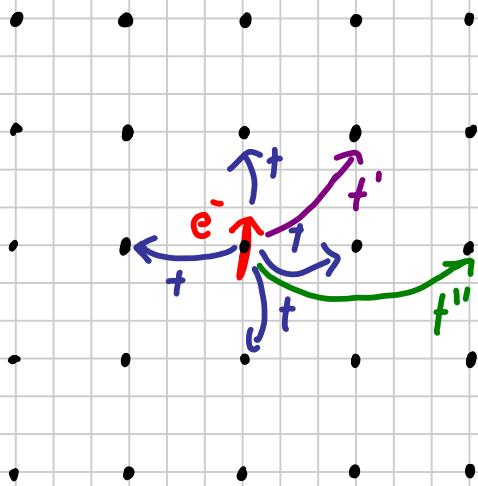
1. Schritt: Tight-binding - Elektronen

Betrachte nicht-wechselwirkende Elektronen im periodischen Gitterpotential $V(\vec{r})$



Die parabolische Dispersion $\epsilon_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ des freien Elektrons wird also in Bloch-Bänder aufgespalten. Dabei kann jedes Band 1 Elektron pro Gitterplatz und Spin aufnehmen.

Beschreibung im Ortsraum (isotroper Fall)



Für gegebenen Bandindex (z.B. $\nu=1$) Hüpfamplituden verschiedener Reichweite, z.B.

$$t_{\vec{i}\vec{j}}^{(\nu)} = \begin{cases} t & \text{falls } i \text{ NN von } j \\ t' & \text{falls } i \text{ NNN von } j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Hamiltonian: $\hat{H} = \sum_{\nu, \vec{0}} \sum_{\vec{i}, \vec{j}} t_{\vec{i}\vec{j}}^{(\nu)} \hat{c}_{\vec{j}\vec{0}}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{i}\vec{0}}$ (Besetzungszahl-Formalismus)
↑ Erzeuger ↑ Vernichter

Einfachster Fall: 1 Band, nur NN-Hüpfen

$$\hat{H} = -t \sum_{\vec{r}} \sum_{\langle i, j \rangle} (\hat{c}_{i\vec{r}}^{\dagger} \hat{c}_{j\vec{r}} + \hat{c}_{j\vec{r}}^{\dagger} \hat{c}_{i\vec{r}})$$

↖ Paare nächster Nachbarn

Lösung durch Fourier-Transformation Gitterabstand 1

$$\hat{H} = -t \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \hat{v}_{\vec{k}\vec{0}} \quad \text{mit} \quad \epsilon_{\vec{k}} = \sum_{\alpha=1}^d 2 \cos(k_{\alpha})$$

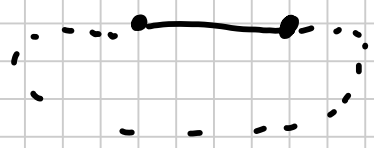
und $\hat{v}_{\vec{k}\vec{0}} = \hat{c}_{\vec{0}\vec{0}}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}\vec{0}}$ (Eigenwerte 1, 0)

Beispiel Teilchenstatistik: 3 Teilchen, 3 Zustände
 Wieviele Konfigurationen? - 27 falls unterscheidbar,
 10 für Bosonen } ohne innere Freiheitsgrade
 1 für Fermionen }

Für nicht-ww. Fermionen können die Spins separat betrachtet werden (da $H = H_{\uparrow} + H_{\downarrow}$).

1. Anwendung: 2-Platz-Modell

a) Behandlung im Ortsraum



(i) $N=0 \rightarrow H=0 \rightarrow EW 0$

(ii) $N=1 \rightarrow$

$$H = \begin{pmatrix} 101 & 110 \\ 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} 101 \\ 110 \end{matrix} \rightarrow EW 2t, -2t$$

(iii) $N=2 \rightarrow H=0 \rightarrow EW 0$

b) Alternative Behandlung im Impulsraum:

Einteilchen-Energien
 $E_a = -2t \cos(ka)$

k	E_a
0	$-2t$
π	$2t$

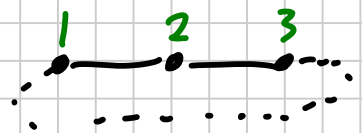
Mögliche Besetzungen

n_0	n_{π}	E
0	0	0
1	0	$-2t$
0	1	$2t$
1	1	0

"Vielteilchen"-Rechnung a) ist also konsistent mit Einteilchen-Rechnung b)

Teilchen-Loch-Symmetrie

2. Anwendung: 3-Platz-Modell



a) Impulsraum-Rechnung

k	ϵ_k
$k_0 = 0$	$-2t$
$k_1 = \frac{2\pi}{3}$	t
$k_2 = \frac{4\pi}{3}$	t

n_0	n_1	n_2	E
0	0	0	0
1	0	0	$-2t$
0	1	0	t
0	0	1	t
1	1	0	$-t$
1	0	1	$-t$
0	1	1	$2t$
1	1	1	0

Teilchen-Loch-Symmetrie

b) Ortsraum-Rechnung

(i) $N=0 \rightarrow H=0 \rightarrow EW=0$

(ii) $N=1 \rightarrow$

$$H \cong -t \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} | \\ | \\ | \\ | \end{matrix} \begin{matrix} 1100 \\ 1010 \\ 1001 \\ 0 \end{matrix}$$

EW $-2t \quad t \quad t$

EV $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$

(iii) $N=2 \rightarrow$

$$H \cong -t \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} | \\ | \\ | \\ | \end{matrix} \begin{matrix} 1110 \\ 1101 \\ 1011 \\ 0 \end{matrix}$$

Teilchen geht über PB

Oftensichtlich sind die Vorzeichen wesentlich, um die Eigenwerte „umzudrehen“:

$$\text{EW} \quad 2t \quad -t \quad -t$$

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

(iv) $N=3 \rightarrow H=0 \rightarrow \text{EW } 0$

Frage: woher kommt das negative Vorzeichen in (iii)?
 Offenbar sind periodische Randbedingungen ursächlich (sonst: Teilchen in $d=1$ unterscheidbar). Allgemeine Regel?

Fundamentale Beschreibung: 2. Quantisierung

2. Quantisierung	Erklärung	Abkürzung
$ 0\rangle$	Vakuum (keine Teilchen)	1000
$c_1^+ 0\rangle$	1 Teilchen an Platz 1	1100
$c_2^+ 0\rangle$	1 " " " 2	1010
$c_2^+ c_1^+ 0\rangle$	Erst ein Teilchen an Platz 1 erzeugt, dann eines an Platz 2	1110

$c_1^+ c_2^+ |0\rangle$ gleicher Zustand? **Nein!**

Vertauschungsrelationen: $[c_{i\sigma}^+, c_{j\sigma'}^+]_+ = c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'}^+ + c_{j\sigma'}^+ c_{i\sigma}^+ = 0$
 $[c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}]_+ = 0$; $[c_{i\sigma}^+, c_{j\sigma'}]_+ = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$ (auch für $i, j, \sigma, \sigma' \rightarrow k, l$)

$\Rightarrow c_1^+ c_2^+ + c_2^+ c_1^+ = 0 \rightarrow c_1^+ c_2^+ |0\rangle = -1110$

Konvention: Zustände sind „positiv“, wenn sie in Reihenfolge der Platznummer befüllt wurden.

Damit lassen sich die Matrixeinträge eindeutig

ermitteln, z. B.:

$$\begin{aligned}
 H |110\rangle &= c_3^\dagger c_2 + c_3^\dagger c_1 \quad (\overset{PBC}{\downarrow} c_2^\dagger c_1^\dagger |0\rangle) \\
 &= (c_3^\dagger \underbrace{c_2 c_2^\dagger}_{1 - c_2^\dagger c_2} c_1^\dagger + c_3^\dagger \underbrace{c_1 c_2^\dagger}_{-c_2^\dagger c_1} c_1^\dagger) |0\rangle \\
 &= (c_3^\dagger c_1^\dagger - c_3^\dagger c_2^\dagger c_2 c_1^\dagger - c_3^\dagger c_2^\dagger \underbrace{c_1 c_1^\dagger}_{1 - c_1^\dagger c_1}) |0\rangle \\
 &= |101\rangle + \underbrace{c_3^\dagger c_2^\dagger c_1^\dagger c_2}_{=0} |0\rangle - |011\rangle
 \end{aligned}$$

Das ist die 1. Zeile der Matrix in (iii).

Beachte: $c_j |0\rangle = 0 \quad \forall j$

$$c_i^{(\pm)} (c_j^{(\pm)} c_k^{(\pm)}) = (c_j^{(\pm)} c_k^{(\pm)}) c_i^{(\pm)} \quad \text{für } i \neq j, i \neq k$$

und jede Kombination von Erz. + Vern.

Folgerung: Hüpfen im Inneren (ohne PBC) führt nie zu Vorzeichen, denn das Erz.+Vern.-Paar $c_{i\pm 1}^\dagger c_i$ kann ohne Vorzeichenwechsel durch die Reihe von Erzeugern des jeweiligen Zustands geschoben werden:

$$\begin{aligned}
 c_{i\pm 1}^\dagger c_i \quad c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger \dots c_i^\dagger \dots c_\gamma^\dagger \dots |0\rangle \quad (\alpha > \beta > \dots > i > \dots > \gamma) \\
 = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger \dots c_{i\pm 1}^\dagger \underbrace{c_i c_i^\dagger}_{=1} \dots c_\gamma^\dagger \dots |0\rangle + (\text{nicht beitragende Terme})
 \end{aligned}$$

Dagegen führt das Hüpfen über die PBC zu einem **Minuszeichen**, falls die Anzahl der übrigen Fermionen ungerade ist, d.h. für N_f **gerade**.

2. Schritt: zusätzliche on-site-Wechselwirkung
 \rightarrow Hubbard-Modell

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\uparrow} (c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

\uparrow
 diagonal im Impulsraum; diagonal im Ortsraum

Terme von \hat{H} :

- entweder Hüpfen von \uparrow -Elektronen
- oder Hüpfen von \downarrow -Elektronen
- oder Wechselwirkung

$$\hat{H} = \hat{H}_{\uparrow} \otimes \mathbb{1}_{\downarrow} + \mathbb{1}_{\uparrow} \otimes \hat{H}_{\downarrow} + H_{\uparrow\downarrow}$$

Beispiel 2 Platz-Modell, $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 1$:

$$H_{\uparrow} = H_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

0.1

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}$$