ZADANIA Z KWANTOWEJ TEORII CIAŁA STAŁEGO

Zestaw III - na 11 i 18.12.2006

6. Rozwiązując Zadanie 5 z poprzedniego zestawu korzystamy z *twierdzenia o wiriale*, które w przypadku kwantowego oscylatora harmonicznego mówi, że wartości oczekiwane energii kinetycznej i potencjalnej są równe.

   Proszę udowodnić twierdzenie o wiriale w wersji ogólnej: jeśli $V(\mathbf{r})$ spełnia warunek $V(\lambda\mathbf{r}) = \lambda^n V(\mathbf{r})$ (tzw. *potencjał jednorodny w sensie uogólnionym*), oraz całki definiujące wartości oczekiwane energii kinetycznej $\langle E_{\text{kin}}\rangle$ i potencjalnej $\langle V(\mathbf{r})\rangle$ w stanie podstawowym są zbieżne, to zachodzi związek:

   $$\langle E\rangle_{\text{kin}} = \frac{n}{2}\langle V(\mathbf{r})\rangle\,,$$

   przy czym wymiar wektora $\mathbf{r}$ jest dowolny, tzn. twierdzenie zachodzi dla dowolnej liczby cząstek w dowolnej liczbie wymiarów. Warto zwrócić uwagę, że tw. o wiriale występuje w niezmienionej postaci w fizyce klasycznej i kwantowej (w wersji klasycznej nawiasy $\langle\ldots\rangle$ oznaczają średniowanie po nieskończenie długim czasie).

   Literatura: Kacper Zalewski, *Wykłady z nierelatywistycznej mechaniki kwantowej* (PWN Warszawa, 1997), s. 101–102.

7. W tzw. *przybliżeniu średniego pola (Hartrée)* dla iloczynu operatorów AB zakładamy, że znikają funkcje korelacji typu:

   $$(A-\langle A\rangle)(B-\langle B\rangle) \overset{MF}{\approx} 0 \quad\Longleftrightarrow\quad AB \overset{MF}{\approx} A\langle B\rangle + \langle A\rangle B - \langle A\rangle\langle B\rangle\,. \tag{3}$$

   Zastosować przybliżenie (3) do wyrazu oddziaływania w hamiltonianie Hubbarda

   $$H = t\sum_{\langle ij\rangle\sigma} c^\dagger_{i\sigma}c_{j\sigma} + U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}. \tag{4}$$

   W pierwszym kroku, proszę zakłożyć orientację *ferromagnetyczną* spinów, tj. wprowadzić parametry:

   $$n = \langle n_{i\uparrow}\rangle + \langle n_{i\downarrow}\rangle \quad \text{- średnie wypełnienie,}$$
   $$m = \langle n_{i\uparrow}\rangle - \langle n_{i\downarrow}\rangle \quad \text{- magnetyzacja;}$$

   następnie wyliczyć energię stanu podstawowego jako ich funkcję $E_0^{(MF)}(n,m)$. Dla $n=1$ znaleźć m odpowiadające minimum energii, rozwiązując równanie wariacyjne:

   $$\left.\frac{\delta E_0^{(MF)}}{\delta m}\right|_{n=1} = 0$$

   Rozważyć osobno przypadki $U>0$ i $U<0$.

   Wskazówka: Hamiltonian (4) po zastosowaniu przybliżenia średniego pola (3) w przypadku ferromagnetycznym redukuje się postaci z Zadania 1. Odpowiednią relację dyspersji wystarczy wycałkować po wartościach wektora falowego k osobno dla $\sigma=\uparrow,\downarrow$, a wyniki zsumować (*Uwaga:* dla $m\neq 0$ wartości pędu Fermiego są różne dla $\sigma=\uparrow,\downarrow$).

8. Rozważyć model Hubbarda (4) w przybliżeniu średniego pola (3), zakładając orientację *antyferromagnetyczną*, dla której magnetyzacja m jest zdefiniowana następująco:

$$m = \begin{cases} \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle \,, & i \in A \\ \langle n_{i\downarrow} \rangle - \langle n_{i\uparrow} \rangle \,, & j \in B \end{cases} ;$$

gdzie węzły podsieci A i B ułożone są naprzemiennie. Otrzymany hamiltonian średniopolowy zmapować na model rozważany w Zadaniu 2 i wykonać obliczenia analogiczne jak w poprzednim zadaniu. Równanie wariacyjne na magnetyzację wystarczy przedyskutować w sposób przybliżony w granicy silnego sprzężenia $t \ll U$.

9. *Fale gęstości ładunku dla modelu Hubbarda*.
   a) Wykazać, że $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = (n_i^2 - n_i)/2$.
   b) Powyższą relację wstawić do hamiltonianu Hubbarda (4), zastosować przybliżenie średniego pola (3), wprowadzić oznaczenia:

   $$\langle n_i \rangle = \begin{cases} n_A, & i \in A \\ n_B, & i \in B \end{cases} ;$$

   $n_A + n_B = 2n$, $n_A - n_B = Q$, i zdiagonalizować otrzymany hamiltonian średniopolowy.
   c) Wyprowadzić równanie wariacyjne na parametr Q dla $n = 1$ i przedyskutować jego rozwiązania w granicy $t \ll U$, osobno dla $U > 0$ i $U < 0$.

10. Proszę przypomnieć wyprowadzone na wykładzie wzory wyrażające operatory spinowe S_i^x, S_i^y, S_i^z za pomocą fermionowych operatorów kreacji i anihilacji. Następnie pokazać, że operator $\mathbf{S}_i^2$ można wyrazić za pomocą operatora liczby cząstek $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ oraz liczby podwójnych obsadzeń $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ na węźle.