

ZADANIA Z KWANTOWEJ TEORII CIAŁA STAŁEGO

Zestaw VII - na 16 i 23.04.2007

20. Wyprowadzić efektywny hamiltonian spinowy $H' = e^S H e^{-S}$ dla modelu Hubbarda w granicy $U \gg t$. Jako generator transformacji przyjąć $S = (T_+ - T_-)/U$, gdzie $T_+ = -t \sum_{j\delta\sigma} n_{j\bar{\sigma}} c_{j\sigma}^\dagger c_{j+\delta,\sigma} (1 - n_{j+\delta,\bar{\sigma}})$, zaś $T_- = T_+^\dagger$. Licząc z dokładnością do wyrazów rzędu t^2/U pokazać, że otrzymany hamiltonian efektywny można zapisać w postaci $H = H_t + H_J$, gdzie $H_J = J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4})$, $J = 4t^2/U$, zaś H_t opisuje przeskoki elektronów w przestrzeni bez podwójnych obsadzeń.

21. Rozważyć model atomu z orbitalami s i f

$$H = \sum_{\sigma} [\epsilon_s c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma} + \epsilon_f f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + V (c_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{\sigma})] + U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow},$$

gdzie ϵ_s i ϵ_f są energiami orbitali, oddziaływanie kulombowskie U występuje tylko na orbitalu f , zaś hybrydyzacja między orbitalami V wynika z efektywnego pola pochodzącego od pozostałych atomów.

Znaleźć energie własne dla dwóch elektronów. Rozważyć przypadki graniczne $U \ll t$ oraz $U \gg t$ i przedyskutować siłę korelacji elektronowych używając jako kryterium redukcję liczby podwójnych obsadzeń na poziomie f .

22. Rozważyć uogólnienie modelu z poprzedniego zadania na sieć

$$H = \sum_{\sigma} \left[\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \epsilon_f f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + V \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}) \right] + U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow},$$

Jest to tzw. *model domieszki Andersona*. Przy założeniu, że U jest duże, oraz $\langle n_f \rangle \approx 1$ (głęboki poziom f) pokazać, że efektywny hamiltonian ma postać

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{2V^2}{U} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'},$$

gdzie $s_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+ = c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}$, itd. Nowy model znany jest w literaturze jako *model Kondo*.

23. Rozważyć model Lieba-Mattisa dla spinów $\mathbf{S}_A = \sum_{j \in A} \mathbf{S}_j$, $\mathbf{S}_B = \sum_{j \in B} \mathbf{S}_j$ z oddziaływaniem antyferromagnetycznym $H_{LM} = (2J/N) \mathbf{S}_A \cdot \mathbf{S}_B$.

- a) Wprowadzić operator spinu całkowitego $\mathbf{S} = \mathbf{S}_A + \mathbf{S}_B$ i pokazać, że energie własne wynoszą

$$E(S_A, S_B, S) = \frac{J}{N} [S(S+1) - S_A(S_A+1) - S_B(S_B+1)].$$

- b) Dodać do hamiltonianu wyraz łamiący symetrię $-B_s(S_A^z - S_B^z)$ i pokazać (dla spinu 1), że

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{B_s \rightarrow 0} \langle \Phi_0 | m_s^z | \Phi_0 \rangle = 0,$$

$$\lim_{B_s \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \Phi_0 | m_s^z | \Phi_0 \rangle = 1,$$

gdzie $m_s^z = (S_A^z - S_B^z)/N$.

Wskazówka do punktu (b). Elementy macierzowe rozszerzonego hamiltonianu należy liczyć w bazie wektorów własnych starego, uwzględniając tylko stany, dla których spiny podsieci są maksymalne $S_A = S_B = N/2$ oraz $M_S = 0$. Przyjąć, że

$$\langle S | S_A^z - S_B^z | S - 1 \rangle = -S \sqrt{\frac{(N+1)^2 - S^2}{4S^2 - 1}} \approx -\frac{N}{2},$$

gdzie zakładamy $1 \ll S \ll N$. Wówczas, otrzymujemy hamiltonian

$$H = \sum_{S=0}^N \left[\frac{JS^2}{N} |S\rangle \langle S| - \frac{NB_s}{2} (|S\rangle \langle S+1| + \text{h.c.}) \right],$$

który jest dyskretną wersją hamiltonianu oscylatora harmonicznego. Wprowadzając funkcję falową $|\Phi\rangle = \sum_S \Phi(S) |S\rangle$ i przechodząc do granicy ciągłej otrzymujemy równanie Schrödingera

$$-\frac{1}{2}\Phi''(S) + \frac{1}{2}\omega^2 S^2 \Phi(S) = \nu \Phi(S),$$

gdzie $\omega = \sqrt{J/B_s}/N$, $\nu = (\epsilon/NB_s) + 1$, któremu odpowiada spektrum energii $\nu_n = (n+1/2)\omega$. Ponieważ $S > 0$, rozwiązania z parzystymi n należy odrzucić, co prowadzi do energii stanu podstawowego ($n = 1$) dla całego układu

$$E_0 + \epsilon = E_0 - NB_s + \frac{3}{2}\sqrt{B_s J}.$$

Pokazać również, że dyspersja S jest rzędu $\Delta S \sim N^{1/2}(B_s/J)^{1/4}$, co uzasadnia przyjęte założenie $1 \ll S \ll N$.