ZADANIA Z KWANTOWEJ TEORII CIAŁA STAŁEGO

Zestaw V - na 4 i 11.01.2010

Proszę dokończyć Zadanie 14. z poprzedniego zestawu (punkty (b) i (c)).

15. W ramach metody transformacji kanonicznych przekształcamy hamiltonian układu oddziałującego postaci $H = H_0 + H_1$ za pomocą transformacji

$$H' = e^{-S} H e^{S}. \tag{12}$$

   a) Wykazać, że takie przekształcenie nie zmienia wartości własnych hamiltonianu. Podać również, jak zmienią się jego wektory własne.

   b) Rozwinąć wyrażenie na H' w szereg potęgowy względem S:

$$H' = H + [H, S] + \frac{1}{2}[[H, S], S] + \dots . \tag{13}$$

   Wskazówka: Rozważyć pomocniczo transformację $H(\tau) = e^{-\tau S} H e^{\tau S}$, obliczyć n–tą pochodną względem τ a następnie wypisać szereg Taylora dla $H(\tau)$.

16. Znaleźć wektory własne i wartości własne Hamiltonianu opisującego oddziaływanie elektron–fonon dla pojedynczego atomu umieszczonego w zewnętrznym potencjale:

$$\mathcal{H} = \epsilon_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} - \lambda (n_d - 1)(a^\dagger + a) + \omega_0 a^\dagger a.$$

Następnie wprowadzić wyraz z potencjałem chemicznym $-\mu n_d$ i przedyskutować zależność liczby elektronów w stanie podstawowym od μ i parametrów modelu.

Wskazówka: Łatwo zauważyć, że hamiltonian komutuje z operatorem liczby elektronów n_d, zatem diagonalizacją można przeprowadzić niezależnie w podprzestrzeniach numerowanych wartościami $n_d = 0, 1, 2$. Przypadek $n_d = 1$ jest najprostszy, gdyż znika wtedy wyraz oddziaływania elektron–fonon. Dla $n_d = 0$ rozważyć transformację kanoniczą (12) o generatorze

$$S = -\frac{\lambda}{\omega_0}(a^\dagger - a)$$

i sprawdzić, że rozwinięcie (13) da się wykonać ściśle (znikają wyrazy zawierające 3 i więcej komutatorów). Przypadek $n_d = 2$ jest analogiczny.

17. Wyprowadzić efektywny Hamiltonian postaci (12) dla atomowego modelu Holsteina

$$\mathcal{H}_{\mathrm{Holstein}} = \sum_j \left[\epsilon n_j + \mathcal{M} n_j \left(b_j^\dagger + b_j \right) + \omega b_j^\dagger b_j \right],$$

gdzie $\mathcal{M} \equiv \alpha\epsilon (h/2\pi M\omega)^{1/2}$, używając transformacji kanonicznej o generatorze

$$S = \sum_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \frac{\mathcal{M}}{\omega} \left(b_j^\dagger - b_j \right).$$

Wyliczyć energię polaronu. Sprawdzić jak transformuje się energia kinetyczna (w najprostszej postaci w ramach modelu ciasnego wiązania) i wyprowadzić efektywną energię kinetyczną poprzez wyśredniowanie wyniku po stanie *próżni fononowej* ($T = 0$).