ZADANIA Z KWANTOWEJ TEORII CIAŁA STAŁEGO

Zestaw VII - na 9 i 16.03.2010

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 $T_+ = -t\sum_{j\delta\sigma} n_{j\bar{\sigma}} c^\dagger_{j\sigma} c_{j+\delta,\sigma}(1 - n_{j+\delta,\bar{\sigma}})$, 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 $H_J = J\sum_{\langle ij\rangle}\left(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j - \frac{1}{4}\right)$, $J = 4t^2/U$, zaś H_t opisuje przeskoki elektronów w przestrzeni bez podwójnych obsadzeń.

21. Rozważyć model atomu z orbitalami s i f

$$H = \sum_\sigma \left[\epsilon_s c^\dagger_\sigma c_\sigma + \epsilon_f f^\dagger_\sigma f_\sigma + V\left(c^\dagger_\sigma f_\sigma + f^\dagger_\sigma c_\sigma\right)\right] + U f^\dagger_\uparrow f_\uparrow f^\dagger_\downarrow f_\downarrow,$$

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 siłe korelacji elektronowych używają jako kryterium redukcję liczby podwójnych obsadzeń na poziomie f.

22. Rozważyć uogólnienie modelu z poprzedniego zadania na sieć

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

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

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

gdzie $s^+_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}'\downarrow}$, 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 $H_{\mathrm{LM}} = (2J/N)\mathbf{S}_A\cdot\mathbf{S}_B$.

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

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

    b) Dodać do hamiltonianu wyraz łamiący symetrię $-B_{\mathrm{s}}(S^z_A - S^z_B)$ i pokazać (dla spinu 1), że

    $$\lim_{N\to\infty}\lim_{B_{\mathrm{s}}\to 0}\langle\Phi_0|\, m^z_{\mathrm{s}}\,|\Phi_0\rangle = 0,$$
    $$\lim_{B_{\mathrm{s}}\to 0}\lim_{N\to\infty}\langle\Phi_0|\, m^z_{\mathrm{s}}\,|\Phi_0\rangle = 1,$$

    gdzie $m^z_{\mathrm{s}} = (S^z_A - S^z_B)/N$.

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

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

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 $\omega = \sqrt{J/B_\mathrm{s}}/N$, $\nu = (\epsilon/NB_\mathrm{s}) + 1$, 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

$$E_0 + \epsilon = E_0 - NB_\mathrm{s} + \frac{3}{2}\sqrt{B_\mathrm{s}J}.$$

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