ZADANIA Z PODSTAW KWANTOWEJ TEORII WIELU CIAŁ (DLA DOKTORANTÓW)

Zestaw XIII - na 30.04.2004

1. Dokończyć Zadanie 2. z poprzedniego zestawu. Wypisać energie i wektory własne Hamiltonianu

$$\mathcal{H} = \epsilon(n_1 + n_2) + \Delta(n_1 - n_2) - t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c^\dagger_{1\sigma} c_{2\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_{i=1,2} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + K n_1 n_2,$$

   dla jednowymiarowych podprzestrzeni $N_e = 2$, $S_z = \pm 1$. W przypadku czterowymiarowej podprzestrzeni $N_e = 2$, $S_z = 0$ wyprowadzić Hamiltonian w postaci macierzy trójprzekątniowej w bazie wektorów własnych operatora odbicia przestrzennego P:

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\!\downarrow \circ\rangle - |\circ \uparrow\!\downarrow\rangle \right) \qquad (P = -1)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\!\downarrow \circ\rangle + |\circ \uparrow\!\downarrow\rangle \right) \qquad (P = 1)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right) \qquad (P = 1)$$

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right) \qquad (P = -1)$$

   gdzie: $|\uparrow\!\downarrow \circ\rangle \equiv c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{1\downarrow} |0\rangle$, $|\circ \uparrow\!\downarrow\rangle \equiv c^\dagger_{2\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow} |0\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle \equiv c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow} |0\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle \equiv c^\dagger_{2\uparrow} c^\dagger_{1\downarrow} |0\rangle$. Zdiagonalizować tę macierz dla przypadków szczególnych $\Delta = 0$, $U = K$. Pokazać, że w przypadku ogólnym wektory własne zależą wyłącznie od bezwymiarowych parametrów $\delta \equiv \Delta/t$ oraz $u = (U - K)/t$ (*mile widziany* będzie krótki referat na temat rozwiązania numerycznego problemu, można np. wykreślić zależności $E_G(\delta)/t$, $\langle n_1 - n_2\rangle(\delta)$, $\langle c^\dagger_1 c_2\rangle(\delta)$ dla kilku ustalonych wartości $u = 0, 2, 4, 8, \ldots$). Przedyskutować rozwiązanie perturbacyjne w granicy $\delta \ll 1$ i policzyć polaryzowalność $\gamma = \partial\langle n_1 - n_2\rangle/\partial\Delta$.

2. Policzyć energię stanu podstawowego atomu helu w przybliżeniu, w którym zakładamy, że orbital typu Slatera

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}$$

   jest podwójnie obsadzony. Wyliczyć odpowiednie całki występujące w Hamiltonianie zapisanym w formaliźmie drugiego kwantowania. Następnie zoptymalizować otrzymane rozwiązanie względem parametru wariacyjnego α i porównać wynik z wartością doświadczalną $E_G^{\text{exp}} \approx -5.8$ Ry. Pokazać, że analogiczne podejście do jonu H^- nie daje stanu związanego (którego energia dokładna wynosi ≈ -1.05 Ry).