ZADANIA Z PODSTAW KWANTOWEJ TEORII WIELU CIAŁ (DLA DOKTORANTÓW)

Zestaw II - na 11.10.2004

1. Korzystając z odpowiednich reguł komutacji (lub antykomutacji) wyprowadzić jawne wyrażenia opisujące działanie operatorów kreacji i anihilacji na wektory bazowe w reprezentacji liczb obsadzeń. Dla bozonów:

$$a_k \left|\ldots, n_k, \ldots\right\rangle = \sqrt{n_k} \left|\ldots, n_k - 1, \ldots\right\rangle ,$$
$$a_k^\dagger \left|\ldots, n_k - 1, \ldots\right\rangle = \sqrt{n_k} \left|\ldots, n_k, \ldots\right\rangle ,$$

   zaś dla fermionów:

$$c_k \left|\ldots, n_k, \ldots\right\rangle = (-1)^{\nu_k} \left|\ldots, n_k - 1, \ldots\right\rangle ,$$
$$c_k^\dagger \left|\ldots, n_k - 1, \ldots\right\rangle = (-1)^{\nu_k} \left|\ldots, n_k, \ldots\right\rangle ,$$

   gdzie ν_k oznacza łączną liczbę cząstek w stanach poprzedzających k–ty. Następnie pokazać jak, wprowadzając odpowiednią numerację stanów bazowych $k \equiv i\sigma$, można w najprostszy sposób przedstawić działanie operatora $t(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i\sigma})$ w układzie jednowymiarowym.

2. Znaleźć wektory własne i wartości własne Hamiltonianu cząsteczki dwuatomowej:

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

   Rachunki należy prowadzić niezależnie w podprzestrzeniach niezmienniczych z ustaloną liczbą elektronów $N_e \equiv n_1 + n_2$ i z–ową składową spinu całkowitego S_z. W przypadku czterowymiarowej podprzestrzeni $N_e = 2$, $S_z = 0$ wyprowadzić reprezentację macierzową Hamiltonianu w bazie wektorów własnych operatora odbicia przestrzennego P:

$$|1\rangle = \left(|\uparrow\!\downarrow \circ\rangle - |\circ \uparrow\!\downarrow\rangle\right)/\sqrt{2}, \quad |2\rangle = \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)/\sqrt{2} \qquad (P = -1)$$
$$|3\rangle = \left(|\uparrow\!\downarrow \circ\rangle + |\circ \uparrow\!\downarrow\rangle\right)/\sqrt{2}, \quad |4\rangle = \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)/\sqrt{2} \qquad (P = 1)$$

   gdzie: $|\uparrow\!\downarrow \circ\rangle \equiv c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle$, $|\circ \uparrow\!\downarrow\rangle \equiv c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle \equiv c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle \equiv c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle$. W takiej reprezentacji, do zdiagonalizowania pozostanie jedynie blok 2×2. Następnie wprowadzić zewnętrzny potencjał chemiczny $\mathcal{H} \to \mathcal{H} - \mu N$ i przedyskutować zależność liczby elektronów w stanie podstawowym od μ oraz parametrów modelu.

3. 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).