Zadania z Kwantowej Teorii Ciała Stałego
Zestaw IV - na 22.11.2001

8. Rozważyć model Hubbarda:

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{3}$$

w *przybliżeniu średniego pola (Hartrée)*, w którym zakładamy znikanie funkcji korelacji typu:

$$(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \stackrel{MF}{\approx} 0 \Longrightarrow AB \stackrel{MF}{\approx} A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle . \tag{4}$$

Zastosować to przybliżenie dla wyrazu oddziaływania w hamiltonianie (3), zakładając orientację *ferromagnetyczną*, tj. wprowadzić parametry:

$$n = \langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle \qquad \text{- średnie wypełnienie,}$$

$$m = \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle \qquad \text{- magnetyzacja;}$$

a następnie wyliczyć energię stanu podstawowego jako ich funkcję $E_0^{(MF)}(n, m)$. Dla $n = 1$ znaleźć m odpowiadające minimum energii, rozwiązując równanie wariacyjne:

$$\left. \frac{\delta E_0^{(MF)}}{\delta m} \right|_{n=0} = 0$$

Rozważyć osobno przypadki $U > 0$ i $U < 0$.

Wskazówka: Hamiltonian (3) po zastosowaniu przybliżenia średniego pola (4) w przypadku ferromagnetycznym redukuje się postaci z Zadania 1. Odpowiednią relację dyspersji wystarczy wycałkować po wartościach wektora falowego k osobno dla $\sigma = \uparrow, \downarrow$, a wyniki zsumować (*Uwaga:* dla $m \neq 0$ wartości pędu Fermiego są różne dla $\sigma = \uparrow, \downarrow$).

9. Rozważyć model Hubbarda (3) w przybliżeniu średniego pola (4), zakładając orientację *antyferromagnetyczną*, dla której magnetyzację m definiujemy następująco:

$$m = \begin{cases} \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle , & i \in A \\ \langle n_{i\downarrow} \rangle - \langle n_{i\uparrow} \rangle , & j \in B \end{cases} ;$$

gdzie węzły podsieci A i B ułożone są naprzemiennie. Otrzymany hamiltonian śreniopolowy zmapować na model rozważany w Zadaniu 2 i wykonać obliczenia analogiczne jak w poprzednim zadaniu.

Wskazówka: Równanie wariacyjne na magnetyzację można rozwiązać w sposób przybliżony w granicy silnego sprzężenia $t \ll U$.

10. *Fale gęstości ładunku dla modelu Hubbarda.*

   a) Wykazać, że $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} = (n_i^2 - n_i)/2$.

   b) Powyższą relację wstawić do hamiltonianu Hubbarda (3), zastosować przybliżenie średniego pola (4), wprowadzić oznaczenia:

$$\langle n_i \rangle = \begin{cases} n_A, & i \in A \\ n_B, & i \in B \end{cases} ;$$

   $n_A + n_B = 2n$, $n_A - n_B = Q$, i zdiagonalizować otrzymany hamiltonian średniopolowy.

   c) Wyprowadzić równanie wariacyjne na parametr Q dla $n = 1$ i przedyskutować jego rozwiązania w granicy $t \ll U$, osobno dla $U > 0$ i $U < 0$.

11. Wyliczyć z definicji postać operatorów spinowych S_x, S_y, S_z w formaliźmie drugiego kwantowania.