Úloha 5: Hubbardův model.

Termín odevzdání: 7. května 2015

Hubbardův hamiltonián je definován výrazem

$$\hat{H} = -t \sum_n \sum_\sigma (\hat{c}^\dagger_{n,\sigma} \hat{c}_{n+1,\sigma} + \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma} \hat{c}_{n,\sigma}) + U \sum_n \hat{N}_{n+} \hat{N}_{n-},$$

kde operátor $\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}$ kreuje elektron do místa n se z-tovou složkou spinu $\sigma\frac{\hbar}{2}$, $\hat{N}_{n\sigma} \equiv \hat{c}^\dagger_{n,\sigma}\hat{c}_{n,\sigma}$ je operátor počtu částic v místě n se spinem $\sigma = \pm$ a t, U jsou reálné konstanty. Vaším cílem je najít spektrum tohoto hamiltoniánu na Fockově prostoru v případě, že elektrony jsou v kvantové dvojtečce, tj. $n = 1, 2$ neboli

$$\hat{H} = -t \sum_\sigma (\hat{c}^\dagger_{1\sigma} \hat{c}_{2,\sigma} + \hat{c}^\dagger_{2,\sigma} \hat{c}_{1,\sigma}) + U(\hat{N}_{1+}\hat{N}_{1-} + \hat{N}_{2+}\hat{N}_{2-}).$$

Pokud máte chuť můžete se do toho pustit přímo sami, nebo se držet následujícího postupu (orientační počet bodů za dosažení jednotlivých etap uveden):

1. Ukažte, že operátor $\hat{c}^\dagger_a \hat{c}_b$ (kde a, b a d představují zkratky pro dvojice n, σ) komutuje s operátorem počtu částic
$$\hat{N} = \sum_d \hat{N}_d \equiv \sum_n \sum_\sigma \hat{N}_{n\sigma}$$
a odtud, že plyne $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$. (2body)

2. Vlastní stavy $\hat{H}$ lze tedy hledat ve vlastních podprostorech $\hat{N}$, tj. v prostorech s určitým počtem N částic. Najděte energii stavů pro $N = 0$ a $N = 4$. (2body)

3. Ve vlastním podprostoru $N = 1$ najděte energii působením $\hat{H}$ na vektory
$$|\phi_{\sigma\pm}\rangle = \hat{c}^\dagger_{1\sigma}|0\rangle \pm \hat{c}^\dagger_{2\sigma}|0\rangle$$
pro $\sigma = \pm$. Podobně lze postupovat pro $N = 3$. (2body)

4. V prostoru $N = 2$ ("half filling") si nejdříve rozmyslete, jaké jsou bázové vektory v bázi obsazovacích čísel. Poté najděte energii stavů $|\psi_\pm\rangle = \hat{c}^\dagger_{2\pm}\hat{c}^\dagger_{1\pm}|0\rangle$. Tyto stavy jsou vlastními stavy z-tové složky celkového spinu odpovídající hodnotě $\pm\hbar$. Napište ve druhém kvantování jeden z posunovacích operátorů celkového spinu $\hat{S}_\pm$. Tento operátor komutuje s $\hat{H}$ (nemusíte ověřovat) a proto je vektor $\hbar\sqrt{2}|\psi_0\rangle = \hat{S}_-|\psi_+\rangle = \hat{S}_+|\psi_-\rangle$ vlastním stavem $\hat{H}$ se stejnou energií jako $|\psi_\pm\rangle$. Najděte tuto energii a $|\psi_0\rangle$. (2body)

5. Ve zbytku prostoru $N = 2$ zkonstruujte matici hamiltoniánu a z jejích vlastních čísel určete poslední tři vlastní energie. (2body)

Nápověda: Při výpočtech používejte kanonické komutační relace

$$\{\hat{c}_a, \hat{c}_b\} = \{\hat{c}^\dagger_a, \hat{c}^\dagger_b\} = 0, \qquad \{\hat{c}_a, \hat{c}^\dagger_b\} = \delta_{ab}$$

a vztahy operátorů $\hat{c}_a$ k bázi obsazovacích čísel.

Poznámka: Hubbardův hamiltonián je důležitým modelem elektronů v pevné látce. Vystihuje základní vlastnosti interagujícího elektronového plynu a přitom se dá (dokonce v případě libovolně dlouhého řetízku $n = 1, 2, .., L$) obsazeného mnoha elektrony vyřešit přesně. Dá se použít ke kvalitativnímu pochopení celé škály jevů od teorie magnetizmu, přes fázové přechody mezi vodičem a izolantem až po teorii vysokoteplotní supravodivosti.