# Úloha 5: Hubbardův model.

*Termín odevzdání: 11. května 2015*

Hubbardův hamiltonián je definován výrazem

$$\hat{H} = -t \sum_n \sum_\sigma (\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}\hat{c}_{n+1,\sigma} + \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma}\hat{c}_{n,\sigma}) + U \sum_n \hat{N}_{n+}\hat{N}_{n-} \equiv \hat{H}_1 + \hat{V},$$

kde operátor $\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}$ kreuje elektron do místa $n$ (v řetízku kvantových teček) 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. V Hubbardově modelu se většinou uvažuje konečný řetízek délky $L$ stočený do koužku, tj. aplikuje se periodická okrajová podmínka, takže sumy přes $n$ běží od 1 do $L$ a indexy $n$ a $n+L$ se ztotožní, takže například $\hat{c}^\dagger_{0,+} \equiv \hat{c}^\dagger_{L,+}$ nebo $\hat{c}^\dagger_{L+1,-} \equiv \hat{c}^\dagger_{1,-}$.

1. Najděte energie stacionárních stavů pro jednočásticové stavy. Vlnové funkce hledejte ve tvaru $|\psi_{k\sigma}\rangle = \sum_n e^{ikn}\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}|0\rangle$ (2body). Pro případ nekonečného řetízku už jsme to dělali na cvičení! Stačí postup zopakovat, aplikovat okrajovou podmínku a normalizaci. Napište kreační operátory těchto stavů $|\psi_{k\sigma}\rangle = \hat{b}^\dagger_{k,\sigma}|0\rangle$ (1bod).

2. Najděte komutační relace jednočásticové části $\hat{H}_1$ Hubbardova hamiltoniánu a kreačních operátorů $\hat{b}^\dagger_{k,\sigma}$ (2body).

3. Pomocí těchto komutačních relací ukažte, že dvouelektronové vlastní stavy Hubbardova hamiltoniánu pro $U = 0$ jsou $\hat{b}^\dagger_{k_1,\sigma_1}\hat{b}^\dagger_{k_2,\sigma_2}|0\rangle$. Najděte energie a vlastní funkce pro dvě nejnižší dvouelektronové hladiny (2body).

4. Započtěte interakční člen pro $U \neq 0$ pro tyto hladiny v prvním řádu poruchové teorie (3body).

***Nápověda:*** Při výpočtech používejte kanonické komutační relace

$$\{\hat{c}_{n,\sigma}, \hat{c}_{n',\sigma'}\} = \{\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}, \hat{c}^\dagger_{n',\sigma'}\} = 0, \qquad \{\hat{c}_{n,\sigma}, \hat{c}^\dagger_{n',\sigma'}\} = \delta_{nn'}\delta_{\sigma\sigma'}$$

a vztahy operátorů $\hat{c}_{n,\sigma}$ k bázi obsazovacích čísel.

***Poznámka:*** Pokud se Vám Hubbardův hamiltonián líbí, můžete se podívat též na DU5 z roku 2015.