

Úloha 5: Hubbardův model.

Termín odevzdání: 16. května 2019

Hubbardův hamiltonián je definován výrazem

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

kde operátor $\hat{c}_{n,\sigma}^{\dagger}$ kreuje elektron do místa n (v řetízku kvantových teček) se z -tovou složkou spinu $\sigma \frac{\hbar}{2}$, $\hat{N}_{n\sigma} \equiv \hat{c}_{n,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{n,\sigma}$ 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 $\hat{c}_{0,+}^{\dagger} \equiv \hat{c}_{L,+}^{\dagger}$ nebo $\hat{c}_{L+1,-}^{\dagger} \equiv \hat{c}_{1,-}^{\dagger}$.

1. Najděte energie stacionárních stavů pro jednočásticové stavy. Vlnové funkce hledejte ve tvaru $|\psi_{k\sigma}\rangle = \sum_n e^{ikn} \hat{c}_{n,\sigma}^{\dagger} |0\rangle$ (2body). Pro případ nekonečného řetízku už jsme to dělali na cvičení! Stačí postup zopakovat, aplikovat okrajovou podmínku a normalizaci. Napište kreační operátory těchto stavů $|\psi_{k\sigma}\rangle = \hat{b}_{k,\sigma}^{\dagger} |0\rangle$ (1bod).
2. Najděte komutační relace jednočásticové části \hat{H}_1 Hubbardova hamiltoniánu a kreačních operátorů $\hat{b}_{k,\sigma}^{\dagger}$ (2body).
3. Pomocí těchto komutačních relací ukažte, že dvouelektronové vlastní stavy Hubbardova hamiltoniánu pro $U = 0$ jsou $\hat{b}_{k_1,\sigma_1}^{\dagger} \hat{b}_{k_2,\sigma_2}^{\dagger} |0\rangle$. Najděte energie a vlastní funkce pro dvě nejnižší dvouelektronové hladiny (2body).
4. Započítejte interakční člen pro $U \neq 0$ pro tyto hladiny v prvním řádu poruchové teorie (3body).

Nápověda: Při výpočtech používejte kanonické komutační relace

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

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.