Mechanika kwantowa IIB: Zadania domowe #6

Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski — 14 stycznia 2019

Info: * - oznacza, że zadanie to jest nieobowiązkowe

Zadanie 1: *Transformacja Bogolubowa dla bozonów*

Rozważ hamiltonian

$$\hat{H} = \varepsilon \left(a_1^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_1 \right) + \Delta \left(a_1 a_2 + h.c \right),$$

gdzie a_1 i a_2 to operatory bozonowe. Zakładamy, że ε i Δ to dodatnie stałe takie, że $\varepsilon > \Delta$.
W celu zapisania hamiltonianu w formie diagonalnej wykonamy transformację Bogolubowa wprowadzając tym samym nowe operatory bozonowe b_1 i b_2. Transformacja jest dana relacjami:

$$a_1 = u b_1 - v b_2^\dagger,$$

$$a_2 = u b_2 - v b_1^\dagger.$$

(a) Transformacja Bogolubowa jest transformacją kanoniczną w związku z tym zachowuje relacje komutacyjne dla operatorów bozonowych. Pokaż, że w związku z tym wymuszony jest warunek

$$u^2 - v^2 = 1.$$

Wynik ten pozwala sparametryzować współczynniki u i v w następujący sposób $u = \cosh \eta$ i $v = \sinh \eta$.
(b) Pokaż, że warunek diagonalności hamiltonianu po wykonaniu transformacji Bogolubowa prowadzi do relacji

$$\operatorname{tgh} 2\eta = \frac{\Delta}{\varepsilon}.$$

Pokaż, że wtedy hamiltonian ma postać

$$\hat{H} = F \left(b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 \right) + G,$$

przy czym wyraź stałe G i F za pomocą ε i Δ.
(c) Korzystając z powyższego wyniku przedstaw argumentację za tym, że stan podstawowy układu $|\Psi_0\rangle$ można zdefiniować za pomocą wyrażenia mówiącego co się stanie po podziałaniu operatorem b_i na stan $|\Psi_0\rangle$. Jaka jest energia stanu podstawowego? Odpowiedzi uzasadnij.
(d) Jaka jest energia najniższego stanu wzbudzonego? Odpowiedź uzasadnij.
(e) Stan podstawowy jest zadany równaniem

$$|\Psi_0\rangle = C \exp(-\operatorname{tgh} \eta \; a_1^\dagger a_2^\dagger)|0\rangle,$$

gdzie $|0\rangle$ to stan próżni dla operatorów a_i, a stała C to pewien czynnik normalizacyjny. Pokaż, że stan ten spełnia warunek omawiany w punkcie (c).
Wsk.: Skorzystać z relacji Bakera-Campbella-Hausdorffa.

Zadanie 2: *Reprezentacja Lehmanna*

Wygodną w rachunkach reprezentacją funkcji Greena jest tzw. reprezentacja Lehmanna. Zdefiniujmy funkcję Greena "większą"

$$G^{>}(\nu, t, t') = -i \left\langle c_\nu(t) c_\nu^\dagger(t') \right\rangle$$

oraz funkcję Greena "mniejszą"

$$G^{<}(\nu, t, t') = i \left\langle c_\nu^\dagger(t') c_\nu(t) \right\rangle ,$$

gdzie c_ν są operatorami fermionowymi. Średnie występujące w ich definicjach są średnimi termicznymi i możemy je wyrazić posługując się bazą własną $\{|n\rangle\}$ rozważanego hamiltonianu, tj. $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. W takim przypadku średnia termiczna jest postaci $\langle \dots \rangle = Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n| \dots |n\rangle$, gdzie $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$.

(a) Pokaż, że

$$G^{>}(\nu, t, t') = -\frac{i}{Z} \sum_{n,m} \mathrm{e}^{-\beta E_n} \mathrm{e}^{i(E_n - E_m)(t-t')} \left| \langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle \right|^2 ,$$

a także

$$G^{<}(\nu, t, t') = \frac{i}{Z} \sum_{n,m} \mathrm{e}^{-\beta E_m} \mathrm{e}^{i(E_n - E_m)(t-t')} \left| \langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle \right|^2 .$$

(b) Retardowana funkcja Greena jest związana z $G^{>}$ i $G^{<}$ w następujący sposób

$$G^R(\nu, t - t') = \theta(t - t') \left[G^{>}(\nu, t, t') - G^{<}(\nu, t, t') \right] .$$

Pokaż, że

$$G^R(\nu, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{|\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2}{\omega + E_n - E_m + i0^+} \left(\mathrm{e}^{-\beta E_n} + \mathrm{e}^{-\beta E_m} \right) .$$

(c) Na podstawie powyższego wyniku pokaż, że funkcja spektralna

$$A(\nu, \omega) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\, G^R(\nu, \omega)$$

jest nieujemna ($A(\nu, \omega) \geqslant 0$).
Wsk.: Wykorzystaj wzór Sochockiego.

Zadanie 3: *Reguła sum dla funkcji spektralnej*

Udowodnij regułę sum dla funkcji spektralnej w przypadku fermionowym, która możemy sformułować równaniem

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega A(\nu, \omega) = 1.$$

Zinterpretuj powyższy wynik posługując się wynikiem z punktu (c) w zadaniu 2.

Zadanie 4: *Funkcja spektralna dla cieczy Fermiego*

W szerokiej klasie układów oddziałujących fermionów zwanych *cieczami Fermiego* funkcja spektralna ma postać

$$A(\mathbf{k}\sigma, \omega) \approx \frac{Z_\mathbf{k}}{\pi} \frac{(1/2\tau_\mathbf{k})}{(\omega - \xi_\mathbf{k}^*)^2 + (1/2\tau_\mathbf{k})^2} + A_{incoh}(\mathbf{k}\sigma, \omega),$$

gdzie $\tau_\mathbf{k}$ jest czasem życia wzbudzenia elementarnego w takim układzie, $\xi_\mathbf{k}^*$ jest zrenormalizowaną energią wzbudzenia, a $Z_\mathbf{k}$ jest stałą dodatnią o wartościach między 0 i 1. W przypadku, gdy $Z_\mathbf{k} \neq 1$ konieczne jest dodanie jest niekoherentnej części funkcji spektralnej $A_{incoh}(\mathbf{k}\sigma, \omega)$ reprezentującej tło (continuum), która jest konieczna, aby spełnić regułę sum z poprzedniego zadania. Wzbudzenia elementarne są w tym przypadku nazywane *kwazicząstkami*. Wyczerpującą fenomenologiczną teorię cieczy Fermiego sformułował jako pierwszy L. Landau w 1957 roku.

Rozważmy przybliżoną postać funkcji spektralnej dla cieczy Fermiego słuszną w pobliżu powierzchni Fermiego daną równaniem

$$A(\mathbf{k}\sigma,\omega) = Z\delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) + (1-Z)\frac{\theta(W - |\omega|)}{2W},$$

gdzie W i Z to dodatnie i rzeczywiste stałe (ponadto $Z \leqslant 1$).
(a) Porównaj oba wyrażenia i przedstaw różnice i podobieństwa.
(b) Sprawdź czy ta funkcja spektralna spełnia regułę sum.
(c) Pokaż, że w zerowej temperaturze pędowa funkcja rozkładu $\langle c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}\rangle$ dla cieczy Fermiego o powyższej funkcji spektralnej posiada skok o amplitudzie Z dla $k = k_F$.

Zadanie 5: *Funkcje Greena dla łańcucha jednowymiarowego*

Rozważ jednowymiarowy model bezspinowych i nieoddziałujących fermionów znajdujących się w jednowymiarowym łańcuchu o N węzłach z periodycznymi warunkami brzegowymi. Hamiltonian tego modelu jest postaci

$$\hat{H} = -t\sum_{j=1}^{N}\left(c^\dagger_{j+1}c_j + \text{h.c.}\right).$$

Przyjmij, że stała sieci $\mathfrak{a} = 1$.
(a) Znajdź retardowaną funkcję Greena $G_0(n,m,\omega)$ w tym przypadku.
Wsk.: Skorzystaj z tego, że $(i\partial_t - \hat{H})G_0(r,t;r',t') = \delta(t-t')\delta(r-r')$, a także bazy diagonalnej hamiltonianu. Przy liczeniu transformaty Fouriera powyższego równania należy zastąpić $\omega \to \omega + i0^+$, aby dostać retardowaną funkcję Greena.
(b) Przechodząc do granicy termodynamicznej ($N \to \infty$) znajdź jakie wartości przyjmuje retardowana funkcja Greena posługując się twierdzeniem o residuach i całkowaniem po odpowiednim konturze.
(c) W punkcie $n = 0$ dodajemy domieszkę, której potencjał jest postaci $V = vc^\dagger_0 c_0$. Pokazać, że retardowana funkcja Greena w przypadku z domieszką ma postać: $G = (1 - G_0V)^{-1}G_0 = G_0 + G_0T(\omega)G_0$, gdzie $T(\omega) = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \dots$.
(d) Pokaż, że

$$T(\omega) = \frac{v}{1 - vG_0(0,0,\omega)}|0\rangle\langle 0|.$$

Zadanie 6: *Równania ruchu dla funkcji Greena*

Dla układu elektronów opisywanego hamiltonianem

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma}\varepsilon_{\mathbf{k}}a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'}v_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{q})a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}a^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}a_{\mathbf{k}',\sigma'}a_{\mathbf{k},\sigma}$$

znajdź równania ruchu dla retardowanej funkcji Greena $G^R(\mathbf{k}\sigma,\omega)$ (patrz zad. 2). Przyjmij, że $v_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{q}) = v_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(-\mathbf{q})$.

Zadanie 7: *Selfenergia i własności kwazicząstek*

Niech retardowana funkcja Greena pewnego układu oddziałujących fermionów ma postać

$$G^R(\mathbf{k}\sigma,\omega) = \frac{1}{\omega - 2\varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{\omega^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} + i\gamma\omega}.$$

Relacja dyspersji elektronów wynosi $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ i ich potencjał chemiczny wynosi μ, ponadto $\gamma > 0$.
(a) Znajdź elektronową selfenergię $\Sigma(\mathbf{k}\sigma,\omega)$ w tym przypadku.
(b) Oblicz energie $\omega_{i,\sigma}$ i czasy życia $\tau_{i,\sigma}$ kwazicząstek w tym przypadku.

(c) Jaki warunek powinien być spełniony, aby pojęcie kwazicząstek było sensowne w tym przypadku?
(d) Policz masy efektywne kwazicząstek wiedząc, że są one związane z selfenergią relacją

$$\frac{m_{i\sigma}(\mathbf{k})}{m} = \frac{1 - \left(\frac{\partial \mathrm{Re}\Sigma_\sigma(\mathbf{k},\omega_{i,\sigma})}{\partial \omega_{i,\sigma}}\right)_{\varepsilon_\mathbf{k}}}{1 + \left(\frac{\partial \mathrm{Re}\Sigma_\sigma(\mathbf{k},\omega_{i,\sigma})}{\partial \varepsilon_\mathbf{k}}\right)_{\omega_{i,\sigma}}}.$$

Wsk.: Wagi spektralne (patrz wykład) dla kwazicząstek są dane równaniem

$$\alpha_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = |1 - \partial_\omega \mathrm{Re}\Sigma_\sigma(\mathrm{k},\omega)|^{-1}_{\omega=\omega_{i,\sigma}}.$$

Zadanie 8*: *Efekt Rudermanna-Kittela*

Rozważ zlokalizowaną domieszkę o spinie 1/2 oddziałującą z elektronami pasma przewodnictwa. Gęstość spinu $\sigma^i(\mathrm{r})$, $i = x, y, z$, dla elektronów pasma jest jednorodna przy braku domieszki. Jak zobaczymy jej obecność powoduje powstanie oscylacji gęstości spinu. Układ jest opisywany hamiltonianem

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{J S^i \hat{\sigma}^i(\mathbf{r}=0)}_{V},$$

gdzie $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$, J to stała sprzężenia domieszki z elektronami pasma, $\hat{\sigma}^i(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r})\sigma^i_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r})$, przy czym $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}, a \sigma^i_{\sigma\sigma'}$ to odpowiednia macierz Pauliego. Zwróć uwagę, że domieszka nie ma dynamiki w tym modelu.
(a) Rozważmy najpierw tylko elektrony pasma. Niech $\varepsilon_\mathbf{k} = \frac{k^2}{2m}$. Nieoddziałująca przyczynowa funkcja Greena w tym przypadku ma postać

$$G_0(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\omega + \varepsilon_F - \varepsilon_\mathbf{k} + i\delta \mathrm{sgn}(\omega)}.$$

Wykonując odpowiednią transformację Fouriera pokaż, że

$$G_0(\mathbf{r},\omega) = -\frac{m}{2\pi r}\exp(i\kappa r\,\mathrm{sgn}\,\omega),$$

gdzie $\kappa = \sqrt{2m(\varepsilon_F+\omega) + i2m\delta\,\mathrm{sgn}\,\omega}$. Dla $\omega \gg \varepsilon_F$ pokaż, że κ jest w przybliżeniu dana przez $\kappa = p_F + \frac{\omega}{v_F}$, gdzie $p_F\sqrt{2m\varepsilon_F} = mv_F$.
(b) Gęstość spinu dla elektronów pasma jest dana równaniem $\sigma^i(\mathbf{r}) = \langle\hat{\sigma}^i(\mathbf{r})\rangle$ można ją otrzymać posługując się oddziałującą przyczynową funkcją Greena

$$G_{\beta\alpha}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\langle \hat{T}\psi_\beta(\mathbf{r},t)\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\mathbf{r}',t')\rangle.$$

Pokaż, że

$$\sigma^i(\mathbf{r}) = -i \lim_{t'\to t+0,\,\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \sigma^i_{\alpha\beta} G_{\beta\alpha}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$$

.
(c) Oddziałującą funkcję Greenamożna obliczyć w ramach rachunku zaburzeń posługując się wyrażeniem

$$G_{\beta\alpha}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -i\frac{\left\langle \hat{T}\psi_{\beta I}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}^\dagger_{\alpha,I}(\mathbf{r}',t')\exp\left(-i\int \mathrm{d}s V_I(s)\right)\right\rangle_0}{\left\langle T\exp\left(-i\int \mathrm{d}s V_I(s)\right)\right\rangle_0},$$

gdzie I oznacza obraz oddziaływania, a średniowanie odbywa się poprzez obłożenie nieoddziałującym stanem podstawowym. Pokaż, że w pierwszym rzędzie w oddziaływaniu dostajemy

$$G_{\beta\alpha}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = \delta_{\alpha,\beta}G_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}';t-t') + JS^i\sigma^i_{\beta\alpha}\int \mathrm{d}s\, G^0(\mathbf{r},t-s)G^0(-\mathbf{r}',s-t'),$$

a zatem odpowiadająca tej funkcji Greena gęstość spinu jest dana równaniem

$$\sigma^i(\mathbf{r}) = -i2JS^i\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}[G^0(\omega,\mathbf{r})]^2.$$

Korzystając z wyniku z podpunktu (a) pokaż, że

$$\sigma^i(\mathbf{r}) = JS_i \frac{mp_F}{4\pi^3} \frac{\cos(2p_F r}{r^3}.$$

Są to tak zwane *oscylacje Rudermanna-Kittela* dla gęstości spinu.