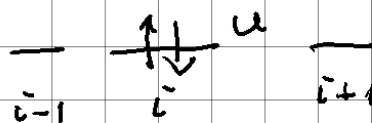
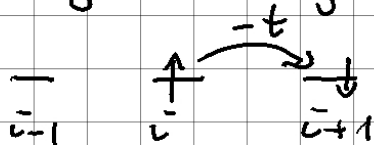


Model Hubbarda

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_i U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

wyraz kinetyczny

wyraz oddziaływania



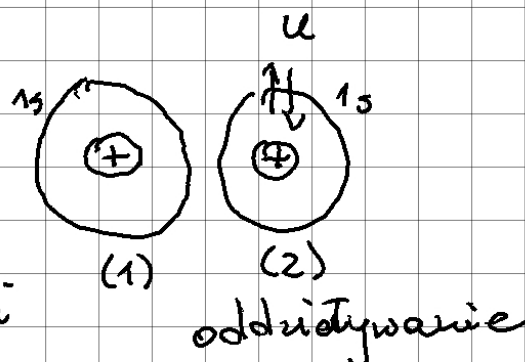
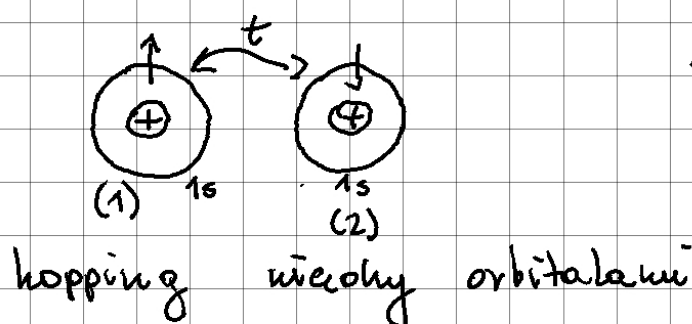
Jest to najprostszy i niezwykle szeroko stosowany model silnie skorelowanych fermionów i pozwala na badanie takich zjawisk jak:

izolatory Motta, ferromagnetyzm, antyferromagnetyzm, ciecze Luttingera oraz nadprzewodnictwo (w tym wiemy się, że poprawnie modeluje on nadprzewodnictwo wysoko-temperaturowe w spiekach ceramicznych na bazie tlenków miedzi - kupraty).

① Dimer Hubbarda

Znaleźć rozwiązania modelu Hubbarda dla "cząsteczki H_2 " postępując się metodą ścisłej diagonalizacji, przy czym ograniczyć przestrzeń stanów do dwóch orbitali $1s$ oraz rozpatrzeć dwa elektrony. Przedyskutować wynik w zależności od całkowitego przesłoku t oraz stałej sprzężenia kulombowskiego U . Skorzystać z symetrii hamiltonianu.

Rozwiązanie:



elektronów znajdujących się na tym samym węźle.

Hamiltonian w tym przypadku
ma postać:

$$\hat{H} = \underbrace{t \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma})}_{\hat{H}_t} + \underbrace{U (\hat{n}_{1\uparrow} \hat{n}_{1\downarrow} + \hat{n}_{2\uparrow} \hat{n}_{2\downarrow})}_{\hat{H}_U}$$

Warto wybrać bazę stanów zgodną
z symetrią hamiltonianu, bo
wtedy macierz hamiltonianu klatkuje
się i łatwiej jest go zdiagnozować.
W naszym przypadku $\hat{H}_t$ oraz $\hat{H}_U$ nie
zmieniają wartości całkowitego spinu
oraz rzutu spinu na oś z stanu na
który działają, czyli

$$[\hat{S}, \hat{H}] = 0 \quad ; \quad [\hat{S}_z, \hat{H}] = 0$$

oznacza to, że S oraz S_z są
zachowywane w tym przypadku.

Wybieramy zatem bazę stanów o
określonym S oraz S_z :

stany trypletowe ($S=1$)

$$|1\rangle = |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle = a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow}^+ |0\rangle \quad (S_z = 1)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ + a_{1\downarrow}^+ a_{2\uparrow}^+) |0\rangle \quad (S_z = 0)$$

$$|3\rangle = |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle = a_{1\downarrow}^+ a_{2\downarrow}^+ |0\rangle \quad (S_z = -1)$$

stany singletowe ($S=0, S_z=0$)

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1 \downarrow_1\rangle - |\uparrow_2 \downarrow_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^+ - a_{2\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+) |0\rangle$$

$$|5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1 \downarrow_1\rangle + |\uparrow_2 \downarrow_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^+ + a_{2\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+) |0\rangle$$

$$|6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ - a_{1\downarrow}^+ a_{2\uparrow}^+) |0\rangle$$

Ponieważ $[\hat{S}, \hat{H}] = 0$ oraz $[\hat{S}_z, \hat{H}] = 0$,

wiec stany trypletowe i singletowe

nie mieszają się, a co więcej

takie stany o różnych S_z się

nie mieszają.

Oznacza to, że

$$\hat{H}_t |1\rangle = 0$$

$$\hat{H}_t |2\rangle = 0$$

$$\hat{H}_t |3\rangle = 0$$

} stany te mają
różne wartości S_z

ponało to

$$\left. \begin{aligned} \hat{H}_u |1\rangle &= 0 \\ \hat{H}_u |2\rangle &= 0 \\ \hat{H}_u |3\rangle &= 0 \\ \hat{H}_u |6\rangle &= 0 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{aby ta część hamiltonianu} \\ &\text{była niezerowa oba elektrony} \\ &\text{muszą znajdować się na} \\ &\text{tym samym atomie } \hat{n}_i^\uparrow, \hat{n}_i^\downarrow. \end{aligned}$$

Zajmujemy się teraz stanami
singletowymi. W tym przypadku hopping
jest możliwy między wszystkimi stanami:

$$\begin{aligned} \hat{H}_t |5\rangle &= t \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma}) \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} + a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle = \\ &= \frac{t}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} \left(\underbrace{a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma}}_{\delta_{\sigma\uparrow} - a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\sigma}} a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} + \underbrace{a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma}}_{\delta_{\sigma\uparrow} - a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\sigma}} a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle \stackrel{\{\{a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma}^{\dagger}\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ij}\}}{=} \\ &= \left\{ \begin{aligned} &a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma} a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} |0\rangle = a_{1\sigma}^{\dagger} a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} a_{2\sigma} |0\rangle = 0 \\ &a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma} a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} |0\rangle = a_{2\sigma}^{\dagger} a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} a_{1\sigma} |0\rangle = 0 \end{aligned} \right\} = \\ &= \frac{t}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} \left(a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\uparrow} - \underbrace{a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\uparrow}^{\dagger}}_{\delta_{\sigma\downarrow} - a_{2\downarrow}^{\dagger} a_{2\sigma}} a_{2\sigma} a_{2\downarrow}^{\dagger} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\uparrow} + \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\uparrow}^{\dagger}}_{\delta_{\sigma\downarrow} - a_{1\downarrow}^{\dagger} a_{1\sigma}} a_{1\sigma} a_{1\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle = \end{aligned}$$

$$= \frac{t}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\uparrow} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\uparrow} - a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\uparrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\downarrow} - a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\uparrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\downarrow}) |0\rangle$$

$$= \frac{t}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\uparrow_2 \downarrow_1\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle - |\downarrow_2 \uparrow_1\rangle \right) = 2t |6\rangle$$

z hermitowskością hamiltonianu

maamy: $\hat{H}_t |6\rangle = 2t |5\rangle$

$$\hat{H}_t |4\rangle = t \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma}) \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} - a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle =$$

$$= \frac{t}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} (-a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma} a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma} a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle =$$

$$\begin{array}{c} \xrightarrow{\delta_{\sigma\uparrow} - a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\sigma}} \quad \xrightarrow{\delta_{\sigma\uparrow} - a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\sigma}} \\ \xrightarrow{\delta_{\sigma\downarrow} - a_{2\downarrow}^{\dagger} a_{2\sigma}} \quad \xrightarrow{\delta_{\sigma\downarrow} - a_{1\downarrow}^{\dagger} a_{1\sigma}} \end{array}$$

$$= \frac{t}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} \left(-a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\uparrow} + a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\uparrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\downarrow} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\uparrow} + \right. \\ \left. - a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\uparrow}^{\dagger} \delta_{\sigma\downarrow} \right) = \frac{t}{\sqrt{2}} \left(-|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle + |\uparrow_2 \downarrow_1\rangle + \right. \\ \left. - |\downarrow_2 \uparrow_1\rangle \right) = 0$$

$$\hat{H}_u |4\rangle = u (\hat{n}_{1\uparrow} \hat{n}_{1\downarrow} + \hat{n}_{2\uparrow} \hat{n}_{2\downarrow}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_1\rangle - |\uparrow_2 \downarrow_2\rangle) =$$

$$= \frac{u}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_1\rangle - |\uparrow_2 \downarrow_2\rangle) = u |4\rangle$$

$$\hat{H}_w |5\rangle = U(\hat{n}_{1\uparrow} \hat{n}_{1\downarrow} + \hat{n}_{2\uparrow} \hat{n}_{2\downarrow}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) =$$

$$= \frac{U}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_1\rangle + |\uparrow_2 \downarrow_2\rangle) = U |5\rangle$$

Macierz hamiltonianu możemy zatem

zapisać w postaci: zerowe, bo $[\hat{H}, \hat{S}_z] = 0$

	$\langle 1 $	$\langle 2 $	$\langle 3 $	$\langle 4 $	$\langle 5 $	$\langle 6 $	
$\hat{H} =$	0	0	0	0	0	0	$ 1\rangle$
podprzestrzeń trypletowa	0	0	0	0	0	0	$ 2\rangle$
	0	0	0	0	0	0	$ 3\rangle$
	0	0	0	U	0	0	$ 4\rangle$
zerowe, bo $[\hat{H}, \hat{S}_z] = 0$	0	0	0	0	U	2t	$ 5\rangle$
	0	0	0	0	2t	0	$ 6\rangle$
				podprzestrzeń singletowa			
				zerowe, bo $[\hat{H}, \hat{S}] = 0$			

Energie własne:

$$E_1 = E_2 = E_3 = 0 \leftarrow \text{trójkrotna degeneracja}$$

$$E_4 = U$$

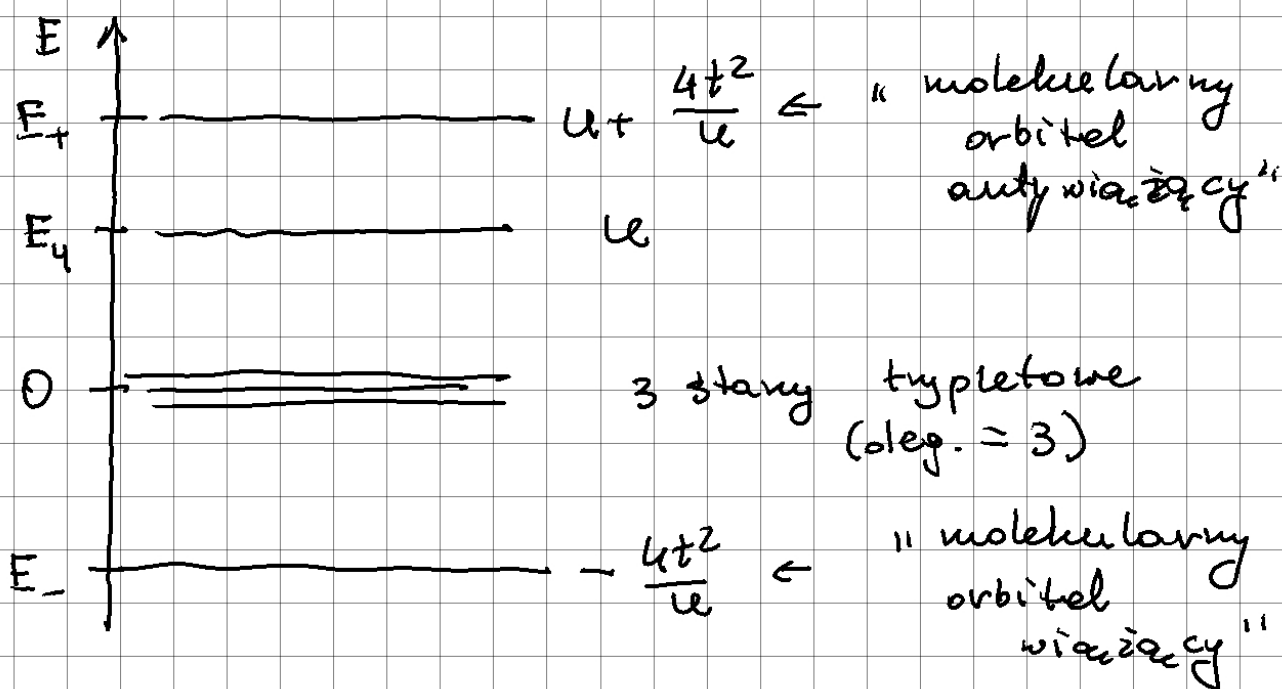
$$\begin{vmatrix} U - \lambda & 2t \\ 2t & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda(\lambda - U) - 4t^2 = \lambda^2 - U\lambda - 4t^2 = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_{\pm} \equiv E_{\pm} = \frac{u}{2} \pm \frac{u}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{4t}{u}\right)^2}$$

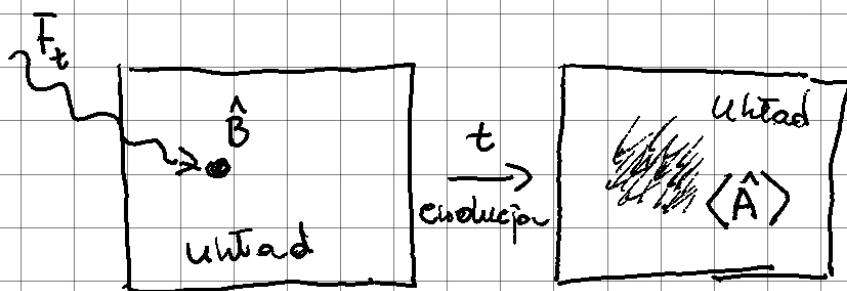
w granicy silnie oddzielających
cząstek ($\frac{4t}{u} \ll 1$):

$$E_{\pm} = \frac{u}{2} \pm \frac{u}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{4t}{u}\right)^2} \approx \frac{u}{2} \pm \frac{u}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{4t}{u}\right)^2\right) =$$

$$= \begin{cases} u + \frac{4t^2}{u} & \text{"+"} \\ -\frac{4t^2}{u} & \text{"-"} \end{cases}$$



Teoria liniowej odpowiedzi



F_t - pole skalarne zaburzające układ, które sprzęga się do obserwabli $\hat{B}$

Wzrost ewoluując w czasie zmienia
wartości oczekiwanych obserwacji $\hat{A}$
pod wpływem zaburzenia, co możemy
zmienić. Jeżeli zaburzenie jest
małe odpowiedź też możemy obliczyć
w ramach teorii liniowej odpowiedzi
konstatając z tzw. wzoru Kubo:

$$\Delta A_t = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE F(E) G_{AB}^{\text{ret}}(E+i0^+) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right],$$

gdzie $F_t = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right] F(E)$

{notacja
Zubarewa}

↑ adiabatyczne
wtężenie oddzielę-
wania.

oraz $G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle =$

$$= -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_- \rangle,$$

jest dwuczasowa, retardedowa funkcja

Greena, która pełni rolę podobności
logólińskiej.

② Tensor przewodnictwa

Wykorzystując teorię liniowej odpowiedzi znaleźć postać tensora przewodnictwa dla N elektronów o ładunku q oraz masie m w metalu. Jako pole zaburające rozważać będziemy pole elektryczne, które jest jednorodne w przestrzeni oraz oscylujące w czasie:

$$\vec{E}_t = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right) \vec{E}(E),$$

gdzie $\vec{E}$ jest wektorem natężenia pola elektrycznego, które sprzęga się z operatorem elektrycznego momentu dipolowego:

$$\hat{\vec{P}} = \int d^3r \vec{r} \hat{j}(\vec{r}).$$

Zaburzenie będzie powodowało przepływ prądu w układzie opisywany gęstością prądu elektrycznego $\hat{\vec{j}}$.

Rozwiązać:

Dla N punktowych ładunków q_i rozmieszczonych w położeniach $\vec{r}_i(t)$ mamy gęstość ładunku:

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i),$$

czyli wektor polaryzacji wynosi:

$$\hat{\vec{p}} = \int d^3r \vec{r} \sum_{i=1}^N q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_{i=1}^N q_i \vec{r}_i$$

całkowity oddziaływanie z zewnętrznym polem elektrycznym ma postać:

$$V_t = -\vec{p} \cdot \vec{E}_t = -\frac{1}{2\pi\hbar^2} \sum_{\alpha=x,y,z} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + i0^+)t\right] p^\alpha E^\alpha(E)$$

Będziemy starali się zbadać wpływ

zmiennego pola elektrycznego na gęstość prądu, która dana jest równaniem:

$$\hat{\vec{j}} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N q_i \frac{\hat{\vec{r}}_i}{\tau_i} = \frac{1}{V} \hat{\vec{p}}$$

przy braku pola elektrycznego $\langle \vec{j} \rangle_0 = 0$.

stosując wzór Kubo dostajemy:

$$\langle j^\beta \rangle = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \varepsilon_t^{\alpha} \langle\langle j^\beta(t); P^\alpha(t') \rangle\rangle$$

lub w reprezentacji energetycznej:

$$\langle j^\beta \rangle_t = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right] \sigma^{\alpha\beta}(E) \varepsilon^{\alpha}(E)$$

Równanie to jest kwantowa wersja

prawa Ohma, natomiast $\sigma^{\alpha\beta}(E)$

jest tensorem przewodnictwa elektrycznego

w reprezentacji energetycznej:

$$\sigma^{\alpha\beta}(E) \equiv -\frac{1}{\hbar} \langle\langle j^\beta, P^\alpha \rangle\rangle_E$$

↖ retardowana
funkcja Greena

Wyrażenie to ciągle można przepisać

w wygodniejszej formie w tym celu

wykonywamy jednostkę w osie

funkcji Greena (dane przez te

Heaviside'a):

$$\sigma^{\alpha\beta}(E) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle\langle j^\beta(0); P^\alpha(-t) \rangle\rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right] =$$

konstanty z $\theta(t-t')$

$$= \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \langle [j^{\beta}(0), p^{\alpha}(-t)]_- \rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right] dt =$$

$$= \frac{\langle [j^{\beta}(0), p^{\alpha}(-t)]_- \rangle}{E+i0^+} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right] \Big|_0^{\infty} +$$

↑
całkowienie
przez całość

oscylacje
w m

exp(-0^+t) → 0
t → ∞

$$- \int_0^{\infty} dt \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right]}{E+i0^+} \frac{d}{dt} \langle [j^{\beta}(0), p^{\alpha}(-t)]_- \rangle =$$

$$= - \frac{\langle [j^{\beta}(0), p^{\alpha}(0)]_- \rangle}{E+i0^+} + \int_0^{\infty} dt \langle [j^{\beta}(0), \dot{p}^{\alpha}(-t)]_- \rangle \cdot \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E+i0^+)t\right]}{E+i0^+} =$$

$$= - \frac{\langle [j^{\beta}, p^{\alpha}]_- \rangle}{E+i0^+} + iV \frac{\langle \langle j^{\beta} j^{\alpha} \rangle \rangle_E}{E+i0^+}$$

$$[j^{\beta}, p^{\alpha}]_- = \frac{1}{V} \sum_{i,j} q_i q_j [\dot{r}_i^{\beta}, r_j^{\alpha}]_- =$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{m_i} [p_i^{\beta}, r_j^{\alpha}]_- =$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{i,j} q_i q_j \frac{\hbar}{i} \frac{\delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}}{m_i} =$$

$$= -i\hbar \frac{N}{V} \frac{q^2}{m} \delta_{\alpha\beta}$$

$$m=m_i$$

$$q=q_i \quad \forall i$$

Ostatecznie:

$$\sigma^{\alpha\beta}(E) = i\hbar \frac{N}{V} \frac{q^2}{m(E+i0^+)} \delta_{\alpha\beta} + iV \frac{\langle\langle j^\beta, j^\alpha \rangle\rangle_E}{E+i0^+}$$

przewodnictwo
nieoddzielających
elektronów

(odpowiednik klasycznej
teorii Drudego)

redefiniowana funkcja
Greena przed-przed

ten wyraz
opisuje

wpływ
oddziaływań
elektronów
na przewodnictwo