

Mechanika kwantowa IIB: Ćwiczenia #9

mgr Piotr Zdybel

piotr.zdybel@fuw.edu.pl

www.fuw.edu.pl/~pzdybel/kwant18.html

Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski — 4 grudnia 2018

Zadanie 1: *Dimer Hubbarda*

Znaleźć rozwiązanie modelu Hubbarda dla cząsteczki H_2 posługując się metodą ścisłej diagonalizacji, przy czym ograniczyć przestrzeń stanów do dwóch orbitali $1s$ oraz rozpatrzyć dwa elektrony. Przedyskutować wynik w granicy silnie oddziałujących elektronów $t/U \ll 1$ i narysować diagram poziomów energetycznych. Skorzystać z symetrii hamiltonianu.

Zadanie 2: *Tensor przewodnictwa elektrycznego*

Wykorzystując teorię liniowej odpowiedzi znaleźć postać tensora przewodnictwa elektrycznego $\sigma^{\alpha\beta}$ dla układu N elektronów o ładunku q i masie m w metalu. Jako pole zaburzające rozważać będziemy pole elektryczne, które jest jednorodne w przestrzeni oraz oscylujące w czasie:

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

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

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

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

Omawiane zagadnienia

- 1) Omówienie metody ścisłej diagonalizacji na przykładzie dimeru Hubbarda.
- 2) Rola symetrii w konstruowaniu bazy stanów i korzyści płynące z jej wykorzystania (klatkowanie się macierzy hamiltonianu).
- 3) Przypomnienie pojęcia molekularnego orbitalu wiążącego i antywiążącego.
- 4) Komentarz dotyczący modelu Hubbarda w tym typy zachowań opisywanych za jego pomocą.
- 5) Fizyczna interpretacja teorii liniowej odpowiedzi.
- 6) Przypomnienie wzoru Kubo.
- 7) Wyprowadzenie wyrażenia na tensor przewodnictwa elektrycznego dla metalu.
- 8) Wyznaczenie klasycznej części tensora przewodnictwa opisującej nieoddziałujące elektrony - teoria Drudego.
- 9) Interpretacja retardowanej funkcji Greena prąd-prąd jako odpowiadającej za poprawki pochodzące z oddziaływań.