

MECHANIKA KWANTOWA II B

KOLOKWIUM - ROZWIĄZANIA

$$\textcircled{1} \quad \hat{\vec{S}}_i^{\perp} \cdot \hat{\vec{S}}_j^{\perp} = \hat{S}_i^x \cdot \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \cdot \hat{S}_j^y =$$

$$= \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \cdot \hat{S}_j^+)$$

Interesują nas korelacje dla oddzielnych spinów ($i \neq j$).

Wykonujemy transformację Holsteina-Primakoffa:

$$\hat{S}_i^+ = \sqrt{2S - \hat{n}_i} a_i \xrightarrow{S \gg 1} \sqrt{2S} a_i$$

$$\hat{S}_i^- = a_i^\dagger \sqrt{2S - \hat{n}_i} \xrightarrow{S \gg 1} \sqrt{2S} a_i^\dagger$$

mamy wtedy

$$\hat{\vec{S}}_i^{\perp} \cdot \hat{\vec{S}}_j^{\perp} = \frac{1}{2} (\sqrt{2S})^2 [a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j] =$$

$$= S (a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j) = \quad (1 \text{ pkt.})$$

$\uparrow$
 $i \neq j$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{dla przypadku w którym uwzględniamy } i=j \\ \hat{\vec{S}}_i^{\perp} \cdot \hat{\vec{S}}_j^{\perp} = S (s_{ij} + a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j) \end{array} \right\}$$

$$= \frac{S}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2} \left[e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_i} + e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_j} \right], \quad (1 \text{ pkt.})$$

gdzie wykonamy, że

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} a_{\vec{k}}$$

Mamy, więc

$$\langle \vec{k} | \hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^+ | \vec{k} \rangle = \frac{S}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \left[e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_i} + e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_j} \right] \langle 0 | \underbrace{a_{\vec{k}} a_{\vec{k}_1}^+}_{\delta_{\vec{k}_1, \vec{k}} + a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}}} \underbrace{a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}}^+}_{\delta_{\vec{k}_2, \vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}_2}} | 0 \rangle$$

Ponieważ $a_{\vec{k}'} | 0 \rangle = 0 \quad \forall \vec{k}'$,

wyli także $\langle 0 | a_{\vec{k}'}^+ = 0 \quad \forall \vec{k}'$,

wiec

$$\langle 0 | a_{\vec{k}} a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}} | 0 \rangle = \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}} \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}} \quad (1 \text{ pkt})$$

wyli

$$\langle \vec{k} | \hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^+ | \vec{k} \rangle = \frac{S}{N} \left[e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right] =$$

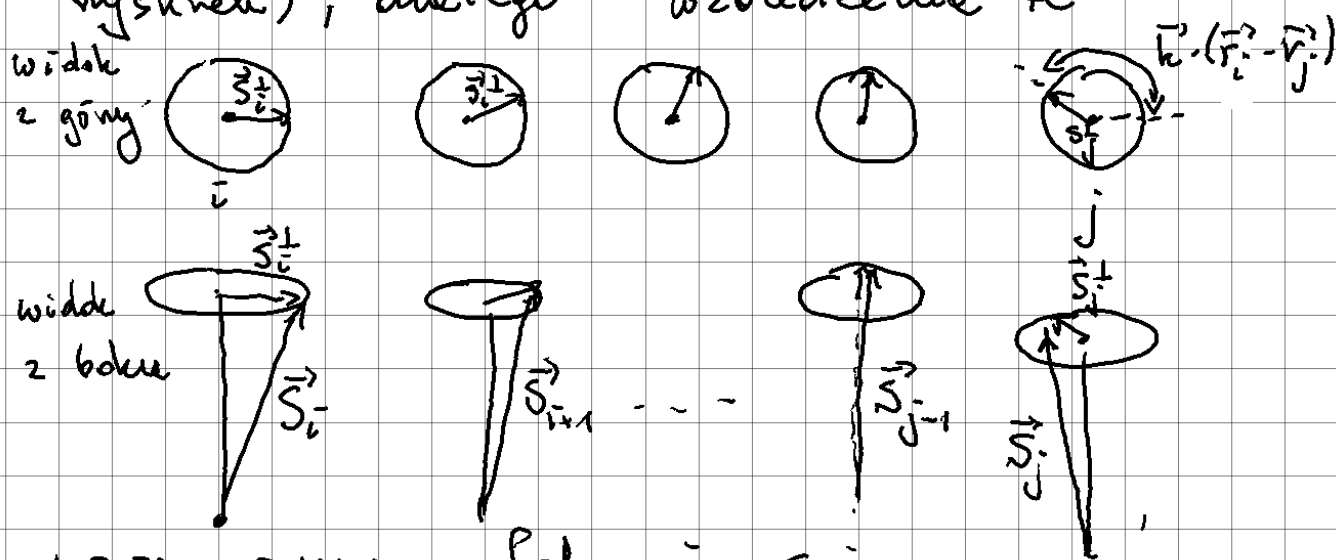
$$= \frac{2S}{N} \cos(\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)) = C_{ij}^+(\vec{k}) \quad (0,5 \text{ pkt})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{przy uwzględnieniu członu } i=j \\ C_{ij}^+(\vec{k}) = S \delta_{ij} + \frac{2S}{N} \cos(\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)) \end{array} \right\}$$

Komentarz:

W stanie $|\vec{n}\rangle$ układ posiada wartość składową poprzeczną spinu o amplitudzie $\sqrt{2S/N}$, która wykonuje precesję

w przestrzeni związaną z $\vec{k}$ (patrz rysunek), dlatego wzbudzenie te



nazywany falami spinowymi.

Składowe poprzeczne spinu na węzle

i na węzle j różni się

o kąt $\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)$,

(0,5 pkt.)

Punktacja:

1°) Zapisanie $\hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^+$ za pomocą operatorów a_i oraz $a_i^\dagger$ - 1 pkt.

2°) Wykonanie odpowiednich transformat
Fouriera - 1 pkt.

3°) Obliczenie wartości oczekiwanej
 $\langle \vec{n} | a_{\vec{k}_1}^\dagger, a_{\vec{n}_2} | \vec{n} \rangle$ - 1 pkt.

4°) Zebranie wyrażenia do końcowej
postaci - 0,5 pkt.

5°) Komentarz odnoszący się
do wzajemnego położenia składników
 $\hat{S}_i^\pm; \hat{S}_j^\pm$ - 0,5 pkt.

SUMA 4 pkt.

Uwaga: Nie uwzględnienie orbity
 $i=j$ nie powoduje zmniejszenia
punktacji

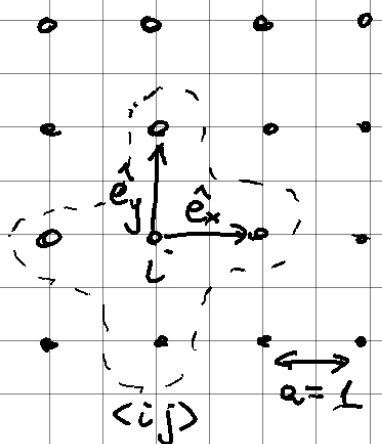
2 $\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + h.c.)$

(a) Będziemy wykorzystywać

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} c_{\vec{k}\sigma},$$

przy założeniu periodycznych warunków brzegowych:

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L_i} = \frac{2\pi n_i}{N_i a} \underset{a=1}{=} \frac{2\pi n_i}{N_i}, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$



$$\hat{H} = -t \sum_{j\sigma} \sum_{\hat{\delta}=\hat{e}_x, \hat{e}_y} (c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j+\hat{\delta},\sigma} + h.c.) =$$

$$= -\frac{t}{N} \sum_{j\sigma} \sum_{\hat{\delta}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \left(c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}'\sigma} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_j + \hat{\delta})} + h.c. \right) =$$

$$= -t \sum_{\sigma} \sum_{\hat{\delta}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \left(c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}'\sigma} e^{i\vec{k}' \cdot \hat{\delta}} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_j e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j}}_{\delta_{\vec{k}, \vec{k}'}} + h.c. \right) =$$

$$= -t \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\hat{\delta}=\hat{e}_x, \hat{e}_y} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} \left(e^{i\vec{k} \cdot \hat{\delta}} + e^{-i\vec{k} \cdot \hat{\delta}} \right) =$$

$$= -2t \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\hat{\delta}=\hat{e}_x, \hat{e}_y} \cos(\vec{k} \cdot \hat{\delta}) c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma},$$

gdyż $\epsilon_{\vec{k}} = -2t \sum_{\delta} \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$

Model ten posiada jedno pasmo energetyczne. (0,5 pkt)

(b) Cechowita

liczba elektronów

liczący z warunków:

$$N_e = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \langle FS | \hat{n}_{k\sigma} | FS \rangle =$$

$$\underset{T=0}{=} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \Theta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{k}})$$

$T=0$

(0,5 pkt)

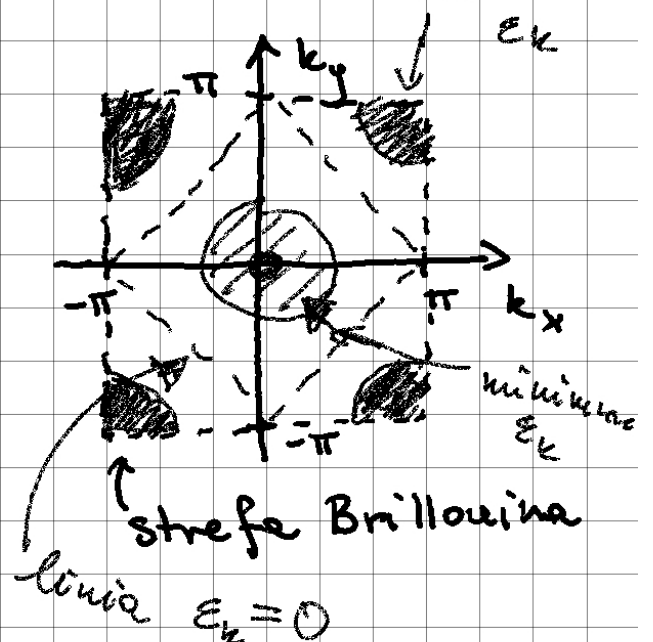
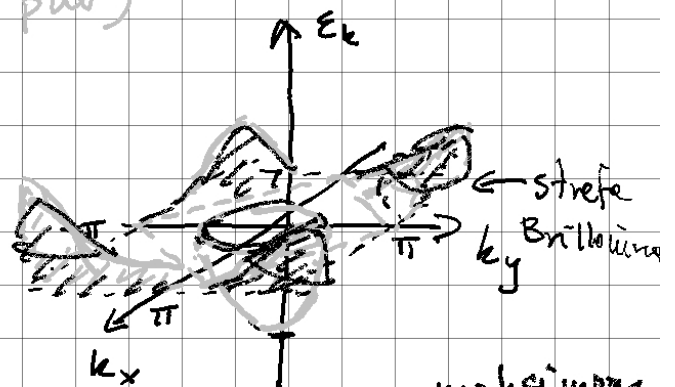
Konstatacja z warunków,

że $L_x, L_y \gg a$,

możemy przejść do

granicy termodynamicznej:

$$N_e = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{degeneracja} \\ \text{spinowa}}}{2} \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) = \underset{\uparrow}{a=1}$$



$$\uparrow \quad \frac{N}{2\pi^2} \int_{\epsilon_k \leq \epsilon_F} d^2k = \frac{N}{2\pi^2} S_{FS}$$

$N = N_x N_y$ - liczba węzłów

$\uparrow$ powierzchnia ograniczona przez powierzchnię Fermiego

$$n = \frac{N_e}{N} = \frac{1}{2\pi^2} S_{FS} \quad (0,5 \text{ pkt})$$

(c) Granice strefy Brillouina możemy znaleźć z periodycznością ϵ_k

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$$

Gdy $\vec{k} = (0,0)$ jest środkiem strefy Brillouina, wtedy jej obszar to kwadrat o bokach $k_x \in [-\pi, \pi]$ oraz $k_y \in [-\pi, \pi]$. W punkcie $\vec{k} = (0,0)$ $\epsilon_{\vec{k}}$ przyjmuje wartość minimalną $-2t$, a w wierzchołkach kwadratu mamy maksima o wartości $2t$. Z warunku $\epsilon_k = 0$ mamy, że $\cos k_x + \cos k_y = 0 \Rightarrow \cos k_x = -\cos k_y$,

a stąd mamy, że

(0,5 pkt)

$$k_y = \pi - k_x, \quad k_y = k_x + \pi \quad \text{+ periodyczność}$$

(i) gdy $n \ll 1$ oznacza to, że tylko niewielka

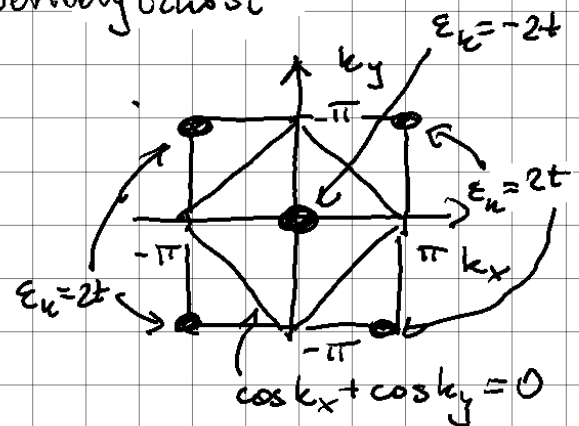
ilość dostępnych

wiejs jest okupowana

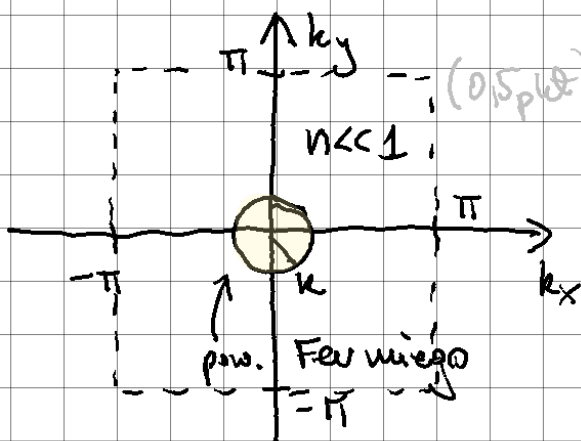
przez elektrony. W stanie podstawowym

zajmują one niewielki obszar wokół

$$\vec{k} = (0, 0).$$



$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) \stackrel{k_x, k_y \ll 1}{\approx} -2t\left(2 - \frac{k_x^2}{2} - \frac{k_y^2}{2}\right) = -4t + t \underbrace{(k_x^2 + k_y^2)}_{k^2}$$



(ii) gdy $n = 1$ obsadzone

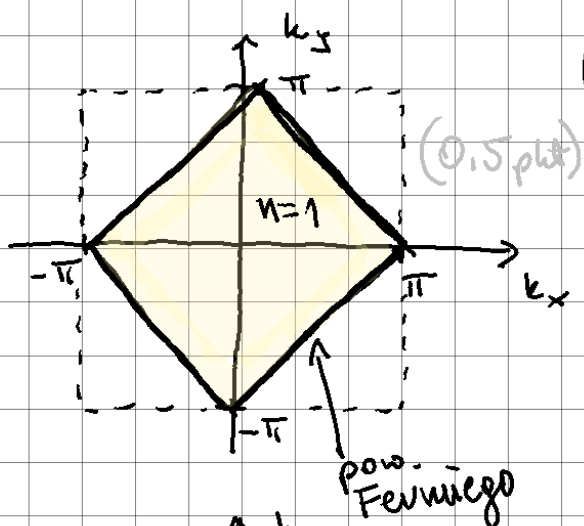
jest dokładnie

połowa dostępnych

wiejs, które znajdują

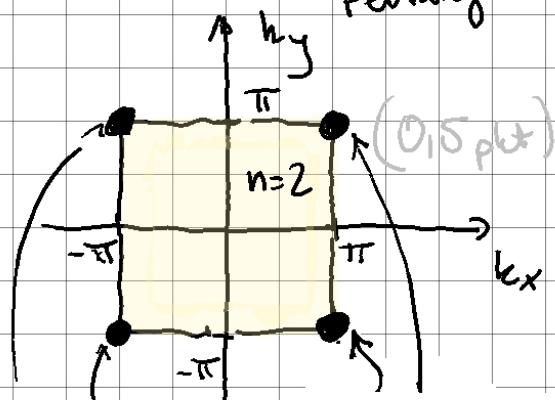
się we wnętrzu kwadratu wyznaczonego

przez warunek $\cos k_x + \cos k_y = 0$



(iii) dla $n=2$

wszystkie stany s_z
 s_z obsadzone, czyli
 wypełniona jest
 cała strefa Brillouina



Powiększenie Fermiego
 to cztery punkty w
 narożnikach

Punktacja

- 1°) Zapisanie hoppingu
 do najbliższych
 sąsiadów ze pomocą
 wektorów $\hat{e}_x$ i $\hat{e}_y$ - 1 pkt.
- 2°) Wykonanie transformaty Fouriera
 i wykonanie całkowej postaci delty
 Kroneckera - 1 pkt.
- 3°) Zebranie równania do postaci
 diagonalnej i podanie ϵ_n - 0,5 pkt.
- 4°) Odpowiedź na pytanie ile pasm
 ma rozważany model - 0,5 pkt.

5°) Zapisanie wzoru na ilość elektronów N_e w stanie podstawowym - 0,5 pkt.

6°) Pokazanie proporcjonalności między n i J_{SF} oraz znalezienie stałej proporcjonalności - 0,5 pkt.

7°) Podanie wzorów strefy Brillouina przy wykończeniu ϵ_k - 0,5 pkt.

8°) Narysowanie odpowiednich rysunków z ewentualnym uzasadnieniem - 0,5 pkt x 3

SUMA 6 pkt.

Uwaga: przy rysunkach nie odejmuję punktów za brak komentarza