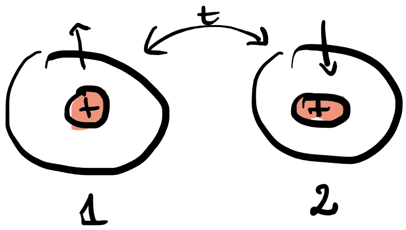
Zad. 2 (ćwiczenia 13)

piątek, 27 stycznia 2017 00:27

1. Znaleźć dokładne rozwiązania modelu Hubbarda dla cząsteczki H_2 ograniczając przestrzeń stanów do dwóch orbitali 1s i dwóch spinów dla ~~jednego~~, dwóch ~~i trzech~~ elektronów. Przedyskutować wynik w zależności od wartości całki przeskoku t i sprzężenia kulombowskiego U.



$$\hat{H} = \underbrace{t\sum_{\sigma}\left(a^{+}_{1\sigma}a_{2\sigma} + a^{+}_{2\sigma}a_{1\sigma}\right)}_{H_t} + \underbrace{U\left(n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow}n_{2\downarrow}\right)}_{H_U}$$

Wybieramy następującą bazę stanów odpowiadającą sytuacji fizycznej:

$S=1$ tryplet

$$|1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = a^{+}_{1\uparrow}a^{+}_{2\uparrow}|0\rangle \qquad S_z = 1$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^{+}_{1\uparrow}a^{+}_{2\downarrow} + a^{+}_{1\downarrow}a^{+}_{2\uparrow}\right)|0\rangle \qquad S_z = 0$$

$$|3\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = a^{+}_{1\downarrow}a^{+}_{2\downarrow}|0\rangle \qquad S_z = -1$$

$S=0$ singlety

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^{+}_{1\uparrow}a^{+}_{1\downarrow} - a^{+}_{2\uparrow}a^{+}_{2\downarrow}\right)|0\rangle$$

$$|5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^{+}_{1\uparrow}a^{+}_{1\downarrow} + a^{+}_{2\uparrow}a^{+}_{2\downarrow}\right)|0\rangle \qquad S_z = 0$$

$$|6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^{+}_{1\uparrow}a^{+}_{2\downarrow} - a^{+}_{1\downarrow}a^{+}_{2\uparrow}\right)|0\rangle$$

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

$\Rightarrow$ S oraz S_z są zachowywane, czyli nie ma przeskoków między st. trypletowymi, a singletami

$$H_t|1\rangle = t\sum_\sigma \left(a^+_{1\sigma} a_{2\sigma} + a^+_{2\sigma} a_{1\sigma}\right) a^+_{1\sigma} a^+_{2\uparrow}|0\rangle =$$

$$= \left\{ \{a_{i\sigma}, a^+_{j\sigma'}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'} \right\} = -t a^+_{1\uparrow} a^+_{1\uparrow}|0\rangle = 0$$

$H_u|1\rangle = 0$ ← bo zawsze, któryś z op. $n_{i\sigma} = 0$

Analogicznie dla pozostałych stanów trypletowych

$$\hat{H}|1\rangle = 0 \qquad \hat{H}|2\rangle = 0 \qquad \hat{H}|3\rangle = 0$$

$$H_t|5\rangle = t\sum_\sigma \left(a^+_{1\sigma} a_{2\sigma} + a^+_{2\sigma} a_{1\sigma}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a^+_{1\uparrow} a^+_{1\downarrow} + a^+_{2\uparrow} a^+_{2\downarrow}\right)|0\rangle =$$

$$= \frac{t}{\sqrt{2}} \sum_\sigma \left[a^+_{1\sigma} a_{2\sigma} a^+_{2\uparrow} a^+_{2\downarrow} + a^+_{2\sigma} a_{1\sigma} a^+_{1\uparrow} a^+_{1\downarrow} \right]|0\rangle =$$

$$= \frac{t}{\sqrt{2}} \sum_\sigma \left[a^+_{1\uparrow} a^+_{2\downarrow} + a^+_{2\uparrow} a^+_{1\downarrow} - a^+_{1\sigma} a^+_{2\downarrow}\delta_{\sigma\downarrow} - a^+_{2\sigma} a^+_{1\uparrow}\delta_{\sigma\downarrow} \right]|0\rangle =$$

$$= \frac{t}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle \right) = 2t|6\rangle$$

Analogicznie $H_t|6\rangle = 2t|5\rangle$

$H_t|4\rangle = 0$

$H_u|4\rangle = 0 \qquad H_u|5\rangle = U|5\rangle \qquad H_u|6\rangle = 0$

podprzestrzeń trypletowa

$$\hat{H} = \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}\begin{array}{cccccc|c} |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle & |4\rangle & |5\rangle & |6\rangle & \\ \end{array}$$

$$\hat{H} = \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U & 2t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2t & 0 \end{array}\right)\begin{array}{c} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \\ |4\rangle \\ |5\rangle \\ |6\rangle \end{array}$$

podprzestrzeń singletowa

$$E_1 = E_2 = E_3 = 0 \qquad E_4 = U$$

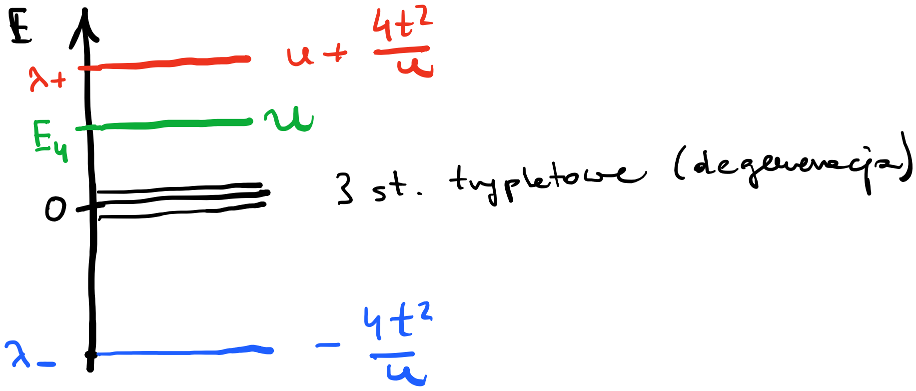
$$\begin{vmatrix} U-\lambda & 2t \\ 2t & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda(\lambda - U) - 4t^2 = \lambda^2 - U\lambda - 4t^2 = 0$$

$$\Rightarrow \quad \lambda_\pm = \frac{U}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{U}{2}\right)^2 + (2t)^2} =$$

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

W granicy silnie oddziałujących cząstek: $\frac{4t}{U} \ll 1$

$$E_\pm \approx \frac{U}{2}\left(1 \pm \left(1 + \frac{1}{2}\left(\frac{4t}{U}\right)^2\right)\right) = \begin{cases} U + \frac{4t^2}{U} \\ -\frac{4t^2}{U} \end{cases}$$


E
λ_+
$u + \frac{4t^2}{u}$
E_4
u
0
3 st. trypletowe (degeneracja)
λ_-
$-\frac{4t^2}{u}$