Mechanika Kwantowa IIB
Ćwiczenia 7, tydz. 5.12.2016

Na wykładzie omówiono drugą kwantyzację.
Przybliżenie Hartree'go-Focka

1. Za pomocą transformacji Bogoljubowa wyznaczyć stany własne Hamiltonianu:

$$\hat{H} = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} (t_1 a_i^\dagger a_{i+1} + t_1 a_{i+1}^\dagger a_i + t_2 a_i a_{i+1} + t_2 a_{i+1}^\dagger a_i^\dagger - 2B a_i^\dagger a_i$$

2. Wyznaczyć średnią liczbę cząstek w stanie $|\mathbf{k}\sigma>$ dla gazu doskonałego w wielkim zespole kanonicznym opisanym operatorem gęstości

$$\hat{\rho} = e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}/\mathrm{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}]$$

gdzie $\beta = 1/k_B T$, μ oznacza potencjał chemiczny, $\hat{N}$ jest operatorem liczby cząstek, a hamiltonian ma następującą postać w reprezentacji liczby obsadzeń:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$$

gdzie $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ jest energią kinetyczną cząstki o pędzie $\hbar\mathbf{k}$. Rozważyć oddzielnie przypadek fermionów i bozonów.

Wsk. Pokazać, że $a_{\mathbf{k}\sigma} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} = e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu)} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} a_{\mathbf{k}\sigma}$ oraz wykorzystać cykliczność śladu i reguły komutacji operatorów kreacji i anihilacji.

3. Pokazać,że energia zjonizowanego układu wielu fermionów w przybliżeniu Hartree'go-Focka $E = \langle \Psi_k | H | \Psi_k \rangle$ w stanie $|\Psi_k\rangle = a_k |\Psi_o^{HF}\rangle$ jest równa $E_{HF} - \epsilon_k$, gdzie ϵ_k jednocząstkowa energia HF orbitalu k, a E_{HF} jest energią stanu podstawowego w przybliżeniu H-F (tw. Koopmansa).

4. Hamiltonian układu elektronów w periodycznym polu sieci krystalicznej można w tzw. przybliżeniu ciasnego wiązania przedstawić w postaci:

$$H = \sum_{i,n,\sigma} W_n c_{i+n,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$$

gdzie i oraz $i+n$ reprezentują węzły sieci $\mathbf{R_i}$ oraz $\mathbf{R_{i+n}}$, a sumowanie po n ogranicza się do najbliższych sąsiadów i. Hamiltonian jest sparametryzowany przez całki przekrycia orbitali ϕ scentrowanych na różnych węzłach sieci z hamiltonianem jednocząstkowym z potencjałem periodycznym $U(\mathbf{r})$:

$$W_n = \int \mathrm{d}^3 r \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i+n}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$

natomiast $c_{i\sigma}$ oznaczają operatory anihilacji cząstki ze spinem σ na orbitalu $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$. Wyznaczyć widmo tego hamiltonianu. Przeprowadzić szczegółową dyskusję przypadku jednowymiarowego w przybliżeniu najbliższych sąsiadów.

5. Korzystając z poprzedniego zadania przeprowadzić analizę widma elektronowego grafenu w przybliżeniu ciasnego wiązania.

6. Znaleźć operator gęstości prądu dla układu elektronów w polu elektromagnetycznym:

$$\hat{H}(t) = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}) \left[\left(\frac{1}{2m}(\vec{p} + e\vec{A})^2 - e\Phi(\vec{r}) \right) \delta_{\sigma\sigma'} + \mu_B(\vec{\sigma} \cdot \vec{B})_{\sigma\sigma'} \right] \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}) + \hat{H}_{int},$$

   gdzie $\mu_B = e\hbar/2m_e$, $\hat{H}_{int}$ - hamiltonian oddziaływania zależny jedynie od $\hat{\psi}$ i $\hat{\psi}^\dagger$.

   Wsk.:

$$\vec{j}(r) = -\frac{\delta \hat{H}}{\delta \vec{A}(\vec{r})}.$$

7. Wyrazić operator gęstości prądu w reprezentacji fal płaskich oraz operator całkowitego prądu w bazie zlokalizowanych orbitali w sieci periodycznej.

8. 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.