

**KURS DOKSZTAŁCAJĄCY**  
**DLA MECHANIKÓW KWANTOWYCH**

Semestr letni 2013

Lecture notes

J. W.

# 1 Wstęp

Spis zagadnień planowanych do poruszenia:

1. Podstawowe pojęcia mechaniki kwantowej: wektor stanu, funkcja falowa, równanie Schrödingera.
2.  $d = 1$ , kanoniczne przykłady teoretycznie: Cząstka w prostokątnej studni potencjału, oscylator harmoniczny, potencjał Morse'a.
3. Numeryczne rozwiązywanie równania Schrödingera metodą 'strzelania'. Kilka przykładów numerycznie (Lennard-Jones)
4. Prosta dynamika. Studnia podwójna i tunelowanie. Zastosowanie: Magnetyki molekularne i pamięci magnetyczne.
5. Rozpraszanie w jednym wymiarze.
6. Jak się tworzą pasma energetyczne w strukturach periodycznych – analitycznie (w granicy  $N \rightarrow \infty$ ) i numerycznie (kilka studni potencjału obok siebie).
7. ? Dynamika nieco bardziej skomplikowana. Rozpływanie się gaussianu? (EXACT) Rozchodzenie się paczki falowej w obecności potencjału? (NUMERIC)
8. Przybliżenie ciasnego wiązania. Model sieciowy cząstek nieoddziałujących. Pasma energetyczne  $d = 1$ ,  $d = 2$ . Przykład z MITologii (Metal-Insulator Transition)
9. Model sieciowy z nieporządkiem. Lokalizacja Andersona w  $d = 1$  i jak ją zobaczyć.
10. ? HuM?

## 2 Podstawowe pojęcia mechaniki kwantowej

### 2.1 Wektor stanu, funkcja falowa

Podstawową wielkością w mechanice kwantowej jest *funkcja falowa*, zwyczajowo oznaczana  $\psi$  i zależna od zmiennych przestrzennych (trzech, jeżeli mamy jedną cząstkę;  $3N$ , jeśli mamy  $N$  cząstek) oraz od czasu.

Informacja fizyczna, którą można wyciągnąć z funkcji falowej, jest mniej pełna, niż było to w przypadku mechaniki klasycznej. W szczególności, obowiązuje *zasada nieoznaczoności*, mówiąca, iż nie można zmierzyć naraz z dowolną dokładnością określonych par obserwabli (np. położenia i pędu). Okazuje się, że niepewności pomiaru  $\Delta \mathbf{x}$  i  $\Delta \mathbf{p}$  są rzędu stałej Plancka:

$$\Delta \mathbf{x} \cdot \Delta \mathbf{p} \sim \hbar. \quad (1)$$

Innym przejawem zasady nieoznaczoności jest jej wersja dla energii i czasu. Jeśli mamy chwilę  $\Delta t$  na pomiar czasu, to energii układu w tym czasie nie możemy zmierzyć dostatecznie dokładnie, a jedynie z dokładnością  $\Delta E$  taką, że

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar. \quad (2)$$

Sama funkcja falowa nie posiada interpretacji fizycznej; posiada ją natomiast kwadrat jej modułu. Interpretacja jest *probabilistyczna*: Jeśli weźmiemy mały obszar przestrzenny o objętości  $\Delta V$ , to  $|\psi|^2 \Delta V$  jest *prawdopodobieństwem* znalezienia cząstki w obszarze.

Stąd wynika warunek na *normalizację* funkcji falowej: Ponieważ prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w *całej* przestrzeni jest równe 1, więc funkcja falowa musi spełniać

$$\int |\psi|^2 d^3V = 1. \quad (3)$$

O funkcjach falowych zakładamy, że mają porządne właściwości matematyczne: Zakładamy, że są ciągłe i różniczkowalne, oraz że są *całkowalne z kwadratem*, tzn. że  $\int |\psi|^2 d^3V < \infty$ .

Zbiór wszystkich funkcji falowych tworzy przestrzeń wektorową, zwaną *przestrzenią Hilberta*. Znaczący to, że stany (wektory z przestrzeni) można *dodawać* (ogólniej – brać ich kombinacje liniowe) i w ten sposób otrzymywać nowe stany. Właśnie ten aspekt odpowiedzialny jest za efekty interferencyjne (nakładanie się fal).

Kto przechodził kurs algebry (lub matematyki), powinien pamiętać, że przestrzeń Hilberta  $\mathcal{H}$  to przestrzeń z *iloczynem skalarnym*, tzn. mamy w niej dodatnio określoną formę biliniową.

Dla przypomnienia: Forma biliniowa: Odwzorowanie  $(\cdot, \cdot) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ , spełniająca, dla dowolnych wektorów  $x, y, z \in \mathcal{H}$  oraz liczby  $\alpha \in \mathbb{C}$ :

- $(x + y, z) = (x, z) + (y, z)$ ,  $(x, y + z) = (x, y) + (x, z)$ ;
- $(x, \alpha y) = \alpha(x, y)$ ,  $(\alpha x, y) = \bar{\alpha}(x, y)$ ,
- $(x, x) \geq 0$ .

W fizyce często stosuje się *notację Diraca*:  $(x, y) \equiv \langle x | y \rangle$ .

Jeszcze, dla odróżnienia, co to jest *wektor stanu* i *funkcja falowa*: Wektor to punkt w przestrzeni wektorowej, a funkcja falowa – to wektor w konkretnej bazie. I tak, będziemy głównie używać *przedstawienia położeniowego* funkcji falowej. Tu na iloczyn skalarny dwu funkcji  $\psi, \phi$  mamy:

$$(\psi, \phi) = \int \bar{\psi}(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Ale równoważne jest *przedstawienie pędowe*, tzn. wyrażenie funkcji falowej jako funkcji pędu. Od jednego przedstawienia do drugiego przechodzi się tu przez transformację Fouriera – odpowiada ona innemu wyborowi bazy w przestrzeni Hilberta.

Jeszcze, z rozędu: Niech  $F : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  – operator liniowy w przestrzeni Hilberta. *Operator sprzężony* do  $F$ , ozn.  $F^\dagger$ , jest określony przez:

$$(x, Fy) = (F^\dagger x, y)$$

dla dowolnych wektorów  $x, y \in \mathcal{H}$ . Mówimy, że  $F$  jest *samosprzężony* (*hermitowski*), gdy  $F = F^\dagger$ .

## 2.2 Równanie Schrödingera z czasem

Analogonem równania Newtona (lub Lagrange’a, lub Hamiltona) jest *równanie Schrödingera* na funkcję falową  $\psi$ , zależną od zmiennych przestrzennych i czasu. Ogólnie ma ono postać:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (4)$$

gdzie  $H$  jest operatorem samosprzężonym, zwanym *operatorem Hamiltona* lub *hamiltonianem*. Dla jednej cząstki w potencjale zewnętrznym  $V(\mathbf{x})$  hamiltonian ma postać taką, jak całkowita energia w mechanice klasycznej:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}), \quad (5)$$

gdzie  $\mathbf{p}$  jest *operatorem pędu*:

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla, \quad (6)$$

zaś  $\Delta$  to laplasjan:

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

## 2.3 Równanie Schrödingera bez czasu

Jeśli potencjał  $V(\mathbf{x})$  w (5) nie zależy od czasu, to równanie Schrödingera można rozseparować. Dokładniej, poszukajmy rozwiązań w postaci iloczynu funkcji, z których jedna zależy tylko od zmiennych przestrzennych, a druga od czasu. Ogólne rozwiązanie równania będzie sumą funkcji tej postaci.

Zakładamy więc, że

$$\psi(\mathbf{x}, t) = u(\mathbf{x})f(t); \quad (7)$$

wstawmy tę postać do (4) i podzielmy przez  $\psi$ . Otrzymamy:

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{u} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u + V(\mathbf{x})u \right]. \quad (8)$$

Lewa strona równania zależy tylko od  $t$ , a prawa tylko od  $\mathbf{x}$ . W ten sposób, obie strony muszą być równe *stałej*, której sens wyjaśnimy za chwilę; nazwijmy ją  $E$ . W ten sposób dostaniemy równanie na  $f$ :

$$\frac{df}{dt} = \frac{1}{i\hbar} E f, \quad (9)$$

które to równanie banalnie się całkuje, otrzymując

$$f(t) = C e^{-iEt/\hbar}. \quad (10)$$

Na funkcję  $u$  otrzymamy teraz równanie

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] u(\mathbf{x}) = Eu(\mathbf{x}). \quad (11)$$

Jaki jest fizyczny sens stałej separacji  $E$ ? W równaniu (9) nie mamy żadnych ograniczeń na  $f$ . W równaniu (11) – też pozornie nie mamy, ale tylko pozornie: O ile rozwiązania (11) istnieją dla *dowolnych* wartości  $E$ , to rozwiązania *fizycznie akceptowalne* – już tylko dla niektórych. Tu 'fizycznie akceptowalne' znaczy: *normowalne*, tzn. takie, że

$$\int |u(\mathbf{x})|^2 d^3x$$

jest skończona. (Takie funkcje nazywamy *całkowalnymi z kwadratem*, lub elementami przestrzeni  $L^2(\mathbb{R}^3)$ ). Wtedy równanie (11) jest *zagadnieniem własnym*, tzn. równaniem na funkcje i wartości własne.

Łącznie na funkcję  $\psi$  mamy

$$\psi(\mathbf{x}, t) = u(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar}. \quad (12)$$

Ogólne rozwiązanie równania (4) jest sumą takich szczególnych rozwiązań. Zauważmy, że w dowolnej chwili czasu

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = |u(\mathbf{x})|^2$$

(bo  $E$  jest rzeczywiste, co się niedługo okaże).

## 2.4 Postulaty mechaniki kwantowej, operatory samosprężone

**Postulat 1.** *Każda zmienna dynamiczna występująca w opisie ruchu cząstki może być reprezentowana przez pewien liniowy operator samosprężony.*

I tak np., operatorem położenia jest operator mnożenia przez  $\mathbf{x}$ ; operatorem pędu jest operator  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ ; operatorem całkowitej energii jest hamiltonian.

Dla każdego takiego operatora  $\Omega$  możemy napisać jego równanie własne:

$$\Omega v_i = \omega_i v_i$$

gdzie  $v_i$  jest funkcją własną  $\Omega$ , z którą stowarzyszona jest wartość własna  $\omega_i$ .

Wartości własne mają bezpośrednie znaczenie fizyczne, o czym mówi

**Postulat 2.** *W wyniku pomiaru zmiennej dynamicznej reprezentowanej przez operator  $\Omega$  możemy otrzymać tylko jedną z jego wartości własnych  $\omega_i$ .*

Chciałoby się mieć gwarancję, że otrzymamy tu wyłącznie *liczby rzeczywiste* (położenie, energię, pęd, ...). Ale to *jest* zagwarantowane przez postulat 1, tylko trzeba sobie przypomnieć, że wartości własne operatorów samosprężonych są rzeczywiste.

Zatrzymajmy się na chwilę przy hamiltonianie. Dla niektórych układów mamy *ciągłe* widmo energii (np. dla cząstki swobodnej – możliwa jest dowolna, większa od zera wartość energii), dla innych (np. atomów) – wartości *dyskretne*.

Okazuje się, że funkcje własne energii można podzielić na dwie klasy: Do pierwszej z nich należą funkcje dobrze zlokalizowane – odpowiadają one dyskretnym wartościom własnym energii. Do drugiej należą funkcje, które pozostają skończone na dowolnie dużych odległościach – odpowiadają one widmu ciągłemu. (Inaczej je też trzeba normować).

Ilustrację faktu, że dopuszczalne energie atomów są dyskretne, mamy na **RYS.**, przedstawiającym widmo atomów Słońca: Przejścia pomiędzy różnymi poziomami energetycznymi manifestują się jako ciemne prążki w widmie.

Linie widmowe są charakterystyczne dla danego pierwiastka – stanowią 'odcisk palca'.

Uwaga o odkryciu helu.

Uwaga o Kirchhoffie i uzyskaniu złota ze Słońca.

*Uwaga.* Nie znaczy to, że nie wolno nam w ogóle posługiwać się operatorami niesamosprężonymi – używa się ich zresztą nagminnie. Ale nie odpowiadają one fizycznym obserwabdom.

Zakładamy, że wszystkie funkcje własne dowolnej zmiennej dynamicznej tworzą układ *zupełny*, tzn. każda funkcja ciągła może być przedstawiona w postaci ich kombinacji liniowej.

Skoro tak, to pewną funkcję falową przedstawmy jako liniową kombinację funkcji własnych  $v_i$  operatora  $\Omega$ :

$$\psi = \sum_i a_i v_i. \quad (13)$$

Dokonajmy teraz pomiaru zmiennej dynamicznej  $\Omega$  na układzie. Jaki wynik otrzymamy? W świetle postulatu 2, jedynymi możliwymi wynikami pomiaru są wartości własne  $\omega_i$ . Ale którą z tych wartości własnych otrzymamy, skoro  $\psi$  (na ogół) nie jest funkcją własną  $\Omega$ ? I tu mamy

Postulat 3. W wyniku pomiaru wielkości  $\Omega$  na stanie opisywanym przez funkcję falową (13) otrzymamy jedną z wartości własnych  $\omega_i$  z prawdopodobieństwem  $|a_i|^2$ . Tak więc możemy być pewni, że otrzymamy w wyniku pomiaru jedną z wartości własnych tylko wtedy, gdy układ jest w jednym ze stanów własnych.

## 2.5 Właściwości funkcji własnych

Zbierzmy tu (i ewentualnie dodajmy nowe) właściwości funkcji własnych operatorów samosprężonych (w szczególności hamiltonianu).

Niech  $\{v_i\}$  będzie zbiorem funkcji własnych jakiegoś operatora samosprężonego (np. hamiltonianu).

- *Zupełność:* Każda funkcja falowa da się przedstawić jako liniowa kombinacja funkcji własnych.
- *Ortogonalność:* Funkcje własne odpowiadające różnym wartościom własnym są *ortogonalne*, tzn.

$$(v_i, v_j) = \int \bar{v}_i(\mathbf{x}) v_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{ij}$$

*Uwaga.* Jeśli się zdarzy, że mamy kilka funkcji odpowiadających tej samej wartości własnej (tzw. przypadek z degeneracją), to *nie muszą* one być ortogonalne. Zawsze jednak w podprzestrzeni tworzonej przez takie funkcje własne *można* wybrać bazę ortogonalną.

- Operatory komutujące mają wspólny układ funkcji własnych.
- *Zasada wariacyjna:* Jeśli  $E_0$  jest energią stanu podstawowego, to dla dowolnej funkcji falowej  $\phi$  mamy

$$E_0 \leq \frac{(\phi, H\phi)}{(\phi, \phi)}.$$

*Uwaga 1.* W ten sposób można oszacować z góry energię stanu podstawowego. Można też szacować od dołu energię stanu podstawowego, ale jest to znacznie trudniejsze.

*Uwaga 2.* Można też podobnie uzyskać oszacowanie z góry energii stanu nie-podstawowego, odpowiednio zmniejszając konkurencję, tzn. ograniczając się do odpowiedniej podprzestrzeni całej przestrzeni Hilberta (tw. o minimaksie).

- Funkcje własne można wybrać jako rzeczywiste (jeśli nie ma pola magnetycznego).
- Funkcja własna stanu podstawowego nie ma miejsc zerowych; tak więc funkcje własne stanów ponadpodstawowych muszą mieć miejsca zerowe ('węzły').
- Stan podstawowy jest niezdegenerowany.

Własności specyficzne dla  $d = 1$ :

- Wszystkie poziomy energetyczne widma dyskretne są niezdegenerowane.
- a)  $n$ -ta funkcja własna ma  $n - 1$  miejsc zerowych, b) więc funkcja własna stanu podstawowego nie ma zer).

*Uwaga.* Ta własność dotyczy tylko  $d = 1$ . Antysymetryczne funkcje falowe układu wielu cząstek mogą mieć miejsca zerowe.

### 3 $d = 1$ , kanoniczne przykłady teoretycznie

Będziemy w tej Section rozwiązywać równanie Schrödingera w jednym wymiarze, o postaci

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (14)$$

#### 3.1 Cząstka w studni potencjału, nieskończenie wysokiej

Zacznijmy od analizy prostego problemu: Cząstka znajduje się w studni potencjału. Ściany tej studni mają nieskończoną wysokość, a wewnątrz cząstka jest swobodna.

Konkretniej, 'setup' wygląda następująco: Cząstka ma masę  $m$ . Potencjał  $V(x) = 0$  dla  $x \in [0a]$ . Na ściankach  $x = 0$  oraz  $x = a$  potencjał jest 'nieskończenie wysoki', (**RYS.**) co znaczy, że cząstka nie może tam się znajdować i tym obszarem się nie zajmujemy.

Równanie Schrödingera ma więc postać

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (15)$$

Pora powiedzieć coś o warunkach brzegowych. Żądamy, aby funkcja falowa była tak gładka, jak to możliwe. (Warunek ten można wyprowadzić z zasady wariacyjnej, zauważając, że funkcja nieróżniczkowalna, a tym bardziej nieciągła prowadzi do dużej energii kinetycznej, więc im gładsza, tym lepiej, tzn. tym niższa jest energia. Dokładniej nie będziemy tego wyprowadzać, narzucając wymaganie ciągłości/gładkości jako warunek brzegowy).

Ponieważ w obszarze poza  $0 \leq x \leq a$  cząstki nie ma, to tam  $\psi(x) = 0$ . Z ciągłości, musimy więc mieć

$$\psi(0) = \psi(a) = 0. \quad (16)$$

Napiszmy ogólne rozwiązanie równania (15), na razie nie zwracając uwagi na warunki brzegowe. Przepiszmy (15) jako:

$$\psi'' + \epsilon\psi = 0$$

gdzie

$$\epsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (17)$$

Ogólne rozwiązanie tego równania to

$$\psi(x) = A \cosh(\sqrt{-\epsilon}x) + B \sinh(\sqrt{-\epsilon}x) \quad \text{dla } E < 0,$$

$$\psi(x) = A \cos(\sqrt{\epsilon}x) + B \sin(\sqrt{\epsilon}x) \quad \text{dla } E > 0.$$

Dla pierwszej możliwości nie uda się spełnić warunków brzegowych. Pozostaje druga możliwość, tzn. trygonometryczna. Warunek znikania funkcji falowej dla  $x = \pm a$  daje:

$$\sqrt{\epsilon}a = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (18)$$

Biorąc pod uwagę definicję (17), mamy:  $\frac{2mE}{\hbar^2} = n^2\pi^2$ , co daje dla energii (tu zaznaczmy zależność od  $n$ :

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (19)$$

a dla funkcji falowych

$$\psi_n(x) = N \sin \frac{n\pi}{a}x, \quad n = 1, 2, \dots \quad (20)$$



$N$  jest dowolnym czynnikiem. Jeśli chcemy, aby funkcja falowa była unormowana, to

$$N = \sqrt{\frac{2}{a}}, \quad \text{więc} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x, \quad n = 1, 2, \dots$$

**Uwaga.** O asymptotyce wartości własnych: Niezależnie od tego, jaka jest postać potencjału  $V$ , mamy, w przypadku nieskończonej wysokości ścian, asymptotyczne zachowanie się wartości własnych takie, jak w przypadku swobodnym:

$$E_n^{(V)} \sim n^2,$$

a dokładniej

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_n^{(V)}}{E_n^{(0)}} = 1, \quad (21)$$

gdzie  $E_n^{(0)}$  – energia własna  $n$ -tego stanu w potencjale  $V(x) = 0$  – jest dana przez (19).

Dowód jest całkiem chytry i wykorzystuje przekształcenie równania różniczkowego (zwane jest ono problemem Sturm – Liouville’a) na równanie całkowe, łatwiejsze do badania. Wykorzystuje się tutaj teorię operatorów zwartych. Dobry odnośnik to notatki prof. P. Urbańskiego, ?? na stronie wydziałowej.

**RYSUNKI:** Funkcje falowe

### 3.2 Cząstka w prostokątnej studni potencjału o skończonej głębokości

Mamy tu cząstkę o masie  $m$  w potencjale  $V(x)$ , określonym następująco:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } |x| \leq a \\ U & \text{dla } |x| > a \end{cases} \quad (22)$$

**RYS.** Jest to *jama*, więc  $U > 0$ .

Naszym celem jest rozwiązanie równania Schrödingera (14) z powyższym potencjałem i znalezienie funkcji własnych oraz wartości własnych (dopuszczalnych energii).

Poniżej zajmujemy się stanami *związanymi*, tzn. o energii  $U > E > 0$ .

**UWAGA** o stanach niezwiązanych o dodatniej (w porównaniu z  $U$ ) energii. (Będziemy rozpatrywać sytuację, gdzie  $E > U$ , tzn.  $E - U > 0$ ; są to tzw. stany rozproszeniowe, zajmiemy się nimi później).

**W obszarze II**, tzn.  $|x| < a$ , potencjał jest równy zeru, tak więc mamy tu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \quad \text{lub} \quad \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

Wprowadźmy oznaczenie:

$$\omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (23)$$

Ogólne rozwiązanie równania Schrödingera w tym obszarze to

$$\psi = B \sin \omega x + C \cos \omega x, \quad \text{skąd} \quad \psi' = \omega B \cos \omega x - \omega C \sin \omega x \quad (24)$$

(pochodnej będziemy za chwilę potrzebować).

**W obszarach I** (tzn.  $x < -a$ ) i **III** (tzn.  $x > a$ ) mamy równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U\psi = E\psi \quad \text{lub} \quad \psi'' + \frac{2m(E - U)}{\hbar^2}\psi = 0$$

i wprowadzając oznaczenie

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}} \quad (25)$$

mamy, w obszarze I, funkcję falową w postaci:

$$\psi = Ae^{+\kappa x} + A'e^{-\kappa x}.$$

Dla energii mniejszej od zera, stany własne muszą być *zlokalizowane*, i z tego powodu współczynnik  $A'$  musi być równy zeru. Ostatecznie mamy w obszarze I:

$$\psi = Ae^{+\kappa x}, \quad \psi' = \text{skąd} \quad \psi' = \kappa Ae^{+\kappa x}. \quad (26)$$

Analogicznie, w obszarze III mamy:

$$\psi = De^{-\kappa x}, \quad \psi' = -\kappa De^{-\kappa x}. \quad (27)$$

Stałe  $A, B, C, D$  nie mogą być dowolne, ponieważ funkcja falowa ma być tak gładka, jak to możliwe. Największą jej gładkość zapewnimy, żądając, aby w punktach  $x = \pm a$  funkcja falowa była ciągła oraz różniczkowalna, tzn. aby na granicach I/II oraz II/III były równe wartości funkcji oraz jej pochodnej.

W ten sposób, na granicy I/II, tzn. dla  $x = -a$ , mamy:

$$\begin{cases} \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a), & \text{co daje: } Ae^{-\kappa a} = -B \sin \omega a + C \cos \omega a \\ \psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a), & \text{co daje: } \kappa Ae^{-\kappa a} = \omega B \cos \omega a + \omega C \sin \omega a \end{cases} \quad (28)$$

Analogicznie na granicy II/III, tzn. dla  $x = +a$ , mamy:

$$\begin{cases} \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), & \text{co daje: } De^{-\kappa a} = B \sin \omega a + C \cos \omega a \\ \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a), & \text{co daje: } -\kappa De^{-\kappa a} = \omega B \cos \omega a - \omega C \sin \omega a \end{cases} \quad (29)$$

Zapiszmy te warunki jednolicie w postaci układu równań *liniowych* na współczynniki  $A, B, C, D$ :

$$\begin{cases} e^{-\kappa a} A + \sin \omega a B - \cos \omega a C + 0 D = 0 \\ \kappa e^{-\kappa a} A - \omega \cos \omega a B - \omega \sin \omega a C + 0 D = 0 \\ 0 A + \sin \omega a B + \cos \omega a C - e^{-\kappa a} D = 0 \\ 0 A + \omega \cos \omega a B - \omega \sin \omega a C + \kappa e^{-\kappa a} D = 0 \end{cases} \quad (30)$$

Powyższy układ jest układem równań na 5 wielkości ( $A, B, C, D$ , oraz – nie zapominajmy – też  $E$ , która tkwi niejawnie w  $\kappa$  oraz  $\omega$ ).

Aby układ (30) miał *niezerowe* rozwiązanie w zmiennych  $A, B, C, D$ , musi zniknąć wyznacznik  $\mathcal{D}$  tego układu. Otrzymamy stąd dopuszczalne wartości energii. Mamy:

$$\mathcal{D} \equiv \begin{vmatrix} e^{-\kappa a} & \sin \omega a & -\cos \omega a & 0 \\ \kappa e^{-\kappa a} & -\omega \cos \omega a & -\omega \sin \omega a & 0 \\ 0 & +\sin \omega a & +\cos \omega a & -e^{-\kappa a} \\ 0 & +\omega \cos \omega a & -\omega \sin \omega a & +\kappa e^{-\kappa a} \end{vmatrix} = 0 \quad (31)$$

Liczmy ten wyznacznik, (tak jak to było uczone na algebrze – przyda się tu rozw. Laplace'a). Wyznacznik okazuje się być równy

$$e^{-2\kappa} (2\omega\kappa \cos(2\omega a) + \kappa^2 \sin(2\omega a) - \omega^2 \sin(2\omega a))$$

i otrzymujemy, po paru przekształceniach, warunek znikania wyznacznika równoważny równaniu (31):

$$\mathcal{D} \equiv 2\omega\kappa \cos(2\omega a) + \kappa^2 \sin(2\omega a) - \omega^2 \sin(2\omega a) = 0 \quad (32)$$

Rozwiążmy to równanie kwadratowe, wyrażając  $\kappa$  jako funkcję pozostałych wielkości. Mamy dwa rozwiązania:

$$\kappa_1 = -\omega \operatorname{ctg} \omega a \quad \text{oraz} \quad \kappa_2 = \omega \operatorname{tg} \omega a. \quad (33)$$

Wygodniej nieco będzie pracować w zmiennych  $\xi, \eta$ :

$$\xi = \omega a, \quad \eta = \kappa a \quad (34)$$

Równania (33) w tych zmiennych przybierają postać

$$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi \quad \text{lub} \quad \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi. \quad (35)$$

Przypomnijmy teraz sobie, że zmienne  $\xi, \eta$  nie są niezależne, lecz obie zawierają energię. Zobaczymy, że:

$$\xi^2 + \eta^2 = a^2(\kappa^2 + \omega^2) = a^2 \frac{2m}{\hbar^2} (E + U - E) = \frac{2mUa^2}{\hbar^2} \equiv R^2.$$

(skorzystaliliśmy tu w drugiej równości z definicji (25) oraz (23), oraz zdefiniowaliśmy  $R$  przez ostatnią równość).

Otrzymujemy zatem następujący układ równań na  $\xi, \eta$ :

$$\begin{cases} \eta = \xi \operatorname{tg} \xi \\ \xi^2 + \eta^2 = R^2 \end{cases} \quad \text{lub} \quad \begin{cases} \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi \\ \xi^2 + \eta^2 = R^2 \end{cases} \quad (36)$$

Każda z dwóch wersji układu jest układem równań *przestępnych* (TRANSCENDENTNYCH)<sup>1</sup> na zmienne  $\xi, \eta$ . Warto na taki układ spojrzeć graficznie **RYS.**. Widać, że wersje: 'tangensowa' i 'cotangensowa' przeplatają się, a także, że dla *dowolnego*  $U$  zawsze istnieje rozwiązanie układu (36) (gałąź 'tangensowa'), a zatem zawsze istnieje co najmniej jeden stan związany.

Mając jakieś rozwiązanie układu (36), można przezeń wyrazić energię:

$$E = -\frac{\hbar^2 \omega^2}{2m} = -\frac{\xi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (37)$$

Wyznamy jeszcze *funkcję falową*. Zrobimy to, rozwiązując układ (30) dla zerującego się wyznacznika, tzn. przy spełnionych warunkach (36). Pamiętając, że rozwiązania są wyznaczone z dokładnością do stałej multiplikatywnej (tzn. czynnika), weźmy np.  $C = 1$ . Wtedy na  $A, B$  otrzymamy dwa równania (dwa pierwsze spośród równań (30)):

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\kappa a}}{\cos \omega a} A + \frac{\sin \omega a}{\cos \omega a} B &= 1 \\ \frac{\kappa e^{-\kappa a}}{\cos \omega a} A - \omega B &= \omega \frac{\sin \omega a}{\cos \omega a} \end{aligned} \quad (38)$$

Weźmy gałąź 'tangensową' rozwiązań, tzn.  $\kappa = \omega \operatorname{tg} \omega a$ . Wtedy powyższy układ (39) przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\kappa a}}{\cos \omega a} A + \frac{\kappa}{\omega} B &= 1 \\ \frac{\kappa e^{-\kappa a}}{\cos \omega a} A - \omega B &= \kappa \end{aligned} \quad (39)$$

<sup>1</sup>Nie mylić z transcendentnymi

którego rozwiązanie jest:

$$A = \cos \omega a e^{\kappa a}, \quad B = 0.$$

Z pozostałych dwóch równań wyznaczamy jeszcze współczynnik  $D$  i mamy rozwiązanie

$$A = \cos \omega a e^{\kappa a}, \quad B = 0, \quad C = 1, \quad D = \cos \omega a e^{\kappa a} = A. \quad (40)$$

Widać stąd, że to rozwiązania są *symetryczne*.

Drugą część rozwiązań otrzymujemy przez wzięcie 'cotangensowej' gałęzi rozwiązań. Postępując analogicznie jak wyżej, dostajemy:

$$A = \sin \omega a e^{\kappa a}, \quad B = 1, \quad C = 0, \quad D = -\sin \omega a e^{\kappa a} = -A. \quad (41)$$

Widać, że tu dla odmiany rozwiązania są *antysymetryczne*.

Wykresy kilku funkcji falowych przedstawiono na **RYS.** dla parametrów [...].

### 3.3 Oscylator harmoniczny

Tu mamy potencjał kwadratowy, i równ. Schrödingera jest:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (42)$$

Zdefiniujmy, (podobnie jak w oscylatorze klasycznym) *częstość* przez:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (43)$$

Wtedy równanie (42) możemy przepisać jako

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi = 0 \quad (44)$$

Oplaca się przeskalować odległość tak, by otrzymać bezwymiarową zmienną. Konkretnie, wprowadźmy:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (45)$$

Różniczkowania po  $x$  skalują się prosto:  $\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi}$ , oraz  $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2}$ , i równanie (44) przyjmuje postać

$$\psi'' + \left( \frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi = 0, \quad (46)$$

gdzie primem oznaczyliśmy różniczkowanie po  $\xi$ .

Będziemy szukać rozwiązań tego równania. Najsamprzwy zbadajmy jego asymptotykę, gdy  $\xi \rightarrow \infty$ . Dla dużych  $\xi$ , w (46) można zaniedbać wyraz z  $E$ , i mamy:

$$\psi'' \approx \xi^2 \psi;$$

dla dużych  $\xi$ , przybliżonym rozwiązaniem jest:  $\psi = e^{\pm \xi^2/2}$  (bowiem  $\psi'' \approx \pm e^{\pm \xi^2/2} + \xi^2 e^{\pm \xi^2/2}$ , i dla dużych  $\xi$  istotny jest tylko drugi wyraz).

Dla dużych  $\xi$ , funkcja falowa powinna dążyć do zera, trzeba więc wziąć znak minus i mamy:

$$\psi \approx e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (47)$$

Mamy już asymptotykę. Teraz będziemy zgadywać dokładną postać rozwiązania. *Załóżmy* rozwiązanie w postaci (co najwyżej nie wyjdzie, jeśli zgadliśmy źle...):

$$\psi(\xi) = \chi(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (48)$$

Odnosnie  $\chi$  też musimy poczynić jakieś założenia nt. asymptotyki: Na pewno musi to być funkcja regularna, oraz nie może rosnać zbyt szybko dla  $\xi \rightarrow \infty$  – konkretnie, nie szybciej niż *exponens*.

Po kilku przeliczeniach (liczenie pochodnych itp. – nic specjalnego, same techniczne rzeczy; **ĆW. – PRZELICZYĆ**) dostajemy z (46) równanie na  $\chi$ :

$$\chi'' - 2\xi\chi' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right)\chi = 0. \quad (49)$$

Oznaczmy:

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n; \quad (50)$$

wtedy równ. (49) jest

$$\chi'' - 2\xi\chi' + 2n\chi = 0. \quad (51)$$

Okazuje się, że *na ogół*, rozwiązanie równania (51) ucieka do nieskończoności wykładniczo, z *wyjątkiem przypadków* kiedy  $n$  jest liczbą *całkowitą* lub zerem; wtedy rozwiązanie jest *wielomianem*.

Przekonać się o tym można przez rozwinięcie w szereg i patrząc na zależność rekurencyjną pomiędzy kolejnymi współczynnikami rozwinięcia.

Sprawdźmy to bezpośrednio, jak to się mówi – 'by inspection'; przeprowadźmy więc inspekcję sytuacji.

Rozwińmy  $\chi(\xi)$  w szereg Taylora, oraz wypiszmy wszystkie potrzebne wyrażenia z (51):

$$\begin{aligned} \chi &= a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + a_3\xi^3 + a_4\xi^4 + \dots \\ \chi' &= +a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + 4a_4\xi^3 + 5a_5\xi^4 + \dots \\ \xi\chi' &= 0 + a_1\xi + 2a_2\xi^2 + 3a_3\xi^3 + 4a_4\xi^4 + \dots \\ \chi'' &= 2a_2 + 2 \cdot 3a_3\xi + 3 \cdot 4a_4\xi^2 + 4 \cdot 5\xi^3 + 5 \cdot 6\xi^4 + \dots \end{aligned}$$

Wstawiając te wyrażenia do (51), mamy przy odpowiednich współczynnikach:

$$\begin{aligned} \xi^0: \quad 2a_2 + 2na_0 = 0 &\implies a_2 = -a_0n \\ \xi^1: \quad 6a_3 + 2(n-1)a_1 = 0 &\implies a_3 = -\frac{1}{2(2\cdot 3)}a_1(n-1) \\ \xi^2: \quad 3 \cdot 4a_4 + 2(n-2)a_2 = 0 &\implies a_4 = -\frac{1}{2(3\cdot 4)}a_2(n-2) \\ \xi^3: \quad 4 \cdot 5a_5 + 2(n-3)a_3 = 0 &\implies a_5 = -\frac{1}{2(4\cdot 5)}a_3(n-3) \\ \xi^4: \quad 5 \cdot 6a_6 + 2(n-4)a_4 = 0 &\implies a_6 = -\frac{1}{2(5\cdot 6)}a_4(n-4) \\ \dots &\dots \end{aligned}$$

Stąd już łatwo zgadnąć (albo i ściśle wyprowadzić) ogólną zależność rekurencyjną:

$$a_k = -\frac{(n-k+2)}{2k(k-1)}a_{k-2}.$$

Widać stąd, że:

- Jeśli  $n$  jest liczbą naturalną (lub zerem), to szereg *urywa się* po skończonej ilości wyrazów – funkcja  $\chi(\xi)$  jest zatem *wielomianem*.
- W wielomianie mogą być wyrazy tylko parzyste albo tylko nieparzyste (inaczej się szereg nie urwie).

- Co się dzieje, gdy  $n$  nie jest liczbą naturalną lub zerem? Otóż wtedy mamy, dla dużych  $k$ :

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} \sim \frac{1}{2k},$$

a asymptotyka tego jest taka sama, jak asymptotyka szeregu określającego  $e^{\xi^2/2}$ , czyli, dla dużych  $\xi$ , mamy:  $\chi(\xi) \approx e^{\xi^2/2}$ . Zatem cała funkcja falowa *nie* maleje eksponencjalnie do zera – dokładniejsze przyjrzenie się da wniosek, że f. falowa *rośnie* eksponencjalnie – zatem nie jest ona fizycznie akceptowalna. zatem

Stąd, pamiętając o (50), otrzymujemy wzór na dopuszczalne wartości energii:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right); \quad (52)$$

widać, że poziomy energii są *równo oddalone* – inaczej niż w o wiele sztywniejszej jamie potencjału o nieskończenie wysokich ścianach.

Teraz popatrzmy na f. własne: Te wielomiany, co się otrzymuje, jak i samo równanie (51) są oczywiście bardzo dobrze znane (nihil novi sub sole...), są ważne i mają swoją nazwę: *wielomiany Hermite'a*. Podamy tu bez dowodu wzór na  $n$ -ty wielomian:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}; \quad (53)$$

Kilka pierwszych wielomianów ma postać **ĆW – SPRAWDZIĆ**:

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2; \quad H_3(\xi) = 12\xi^3 - 8\xi \quad (54)$$

Widać, że na przemian są one parzyste i nieparzyste – co dotyczy też funkcji falowych.

Kilka pierwszych funkcji własnych jest na rysunkach **RYS**.

### 3.4 Potencjał Morse'a

*Potencjał Morse'a* jest zdefiniowany jako:

$$V(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}), \quad A > 0, \quad \alpha > 0; \quad (55)$$

jego wykres, p. **RYS**.. Potencjał o takim kształcie używany jest do opisu krzywej energii potencjalnej cząsteczek dwuatomowych. Parametrami są tu dwie stałe: głębokość potencjału  $A$  oraz położenie minimum, wyznaczane przez stałą  $\alpha$ .

Poziomy energetyczne i funkcje falowe cząstki w potencjale Morse'a dadzą się obliczyć analitycznie, co za chwilę uczynimy.

Innym potencjałem, często używanym do fenomenologicznego opisu krzywej energii potencjalnej dla cząsteczek dwuatomowych, jest tzw. *potencjał Lennarda-Jonesa*. Dla niego nie udało się znaleźć ścisłego rozwiązania, ale bez kłopotu można charakterystyki stanów związanych (energii własne, funkcje falowe) w tym potencjale znaleźć numerycznie. Tym się zajmiemy za chwilę.

Mamy więc równanie Schrödingera, które od razu zapiszemy w postaci

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0, \quad (56)$$

gdzie  $V(x)$  dane jest przez (55).

Stany związane mamy dla  $E < 0$ ; przypadek  $E > 0$  odpowiada widmu ciągłemu.

Warto wprowadzić bezwymiarową zmienną  $\xi$  przez

$$\xi = \frac{2\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar} e^{-\alpha x}. \quad (57)$$

Widać, że  $\xi \geq 0$ . Gdy  $x \rightarrow \infty$ , to  $\xi \rightarrow 0$ ; zaś gdy  $x \rightarrow -\infty$ , to  $\xi \rightarrow +\infty$ .

Łatwo wyrazić potencjał  $V(x)$  przez  $\xi$ :

$$V = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m} \xi^2 - A \frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2mA}} \xi. \quad (58)$$

Teraz, przeliczamy pochodną  $\frac{d}{dx}$  na  $\frac{d}{d\xi}$ :

$$\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = -\alpha \frac{2\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar} e^{-\alpha x} \frac{d}{d\xi} = -\alpha \xi \frac{d}{d\xi},$$

i (po nieskomplikowanych rachunkach) **ĆW – ODTWORZYĆ!** dla drugiej pochodnej

$$\frac{d^2}{dx^2} = \alpha^2 \left( \xi^2 \frac{d^2}{d\xi^2} + \xi \frac{d}{d\xi} \right).$$

Korzystając z tego, przepiszmy równ. Schrödingera w zmiennej  $\xi$ . Po kilku rachunkach (z zakresu zamiany zmiennych w równaniach różniczkowych) mamy:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = \psi'' + \frac{1}{\xi} \psi' + \left[ \frac{2mE}{\alpha^2 \hbar^2} \frac{1}{\xi^2} - \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{2mA}}{\alpha \hbar} \frac{1}{\xi} \right] \psi = 0. \quad (59)$$

(primem oznaczyliśmy tu różniczkowanie po  $\xi$ ). Wprowadźmy dalej oznaczenia:

$$s = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar\alpha}, \quad n + s + \frac{1}{2} = \frac{\sqrt{2mA}}{\alpha\hbar}; \quad (60)$$

(pamiętamy, że  $E < 0$ , zatem  $s$  powyżej jest dobrze określone) w tych oznaczeniach mamy:

$$\psi'' + \frac{1}{\xi} \psi' + \left[ -\frac{1}{4} + \left( n + s + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\xi} - \frac{s^2}{\xi^2} \right] \psi = 0 \quad (61)$$

Musimy teraz zastanowić się, jak będzie wyglądała asymptotyka funkcji falowych w zmiennej  $\xi$ . W przedziale  $0 < \xi < \infty$ , co odpowiada  $-\infty < x < \infty$ , funkcja powinna być regularna. Gdy  $\xi \rightarrow \infty$ , tzn.  $x \rightarrow -\infty$ , funkcja  $\psi$  powinna dążyć do zera. Gdy zaś  $\xi \rightarrow 0$ , tzn.  $x \rightarrow +\infty$ , funkcja  $\psi$  powinna również dążyć do zera.

Popatrzmy teraz na asymptotykę równania (61). Dla dużych  $\xi$ , mamy

$$\psi'' - \frac{1}{4} \psi \approx 0,$$

co daje:  $\psi \approx e^{\pm \xi/2}$ ; z uwag powyżej wynika, że powinniśmy wybrać  $\boxed{\psi \approx e^{-\xi/2}}$ . Z kolei dla  $\xi$  bliskich zera, mamy:

$$\psi'' + \frac{1}{\xi} \psi' - \frac{s^2}{\xi^2} \psi \approx 0,$$

i można sprawdzić, **ĆW** że powyższe równanie jest spełnione przez funkcję *potęgową*:  $\psi \approx \xi^{\pm s}$ . Aby  $\psi$  była nieosobliwa, musimy wziąć znak plus:  $\boxed{\psi \approx \xi^{+s}}$ .

*Zapostulujmy* teraz znów, (tzn. zrobmy Ansatz na) postać funkcji falowej: (co najwyżej nie zgadniemy...)

$$\psi = e^{-\xi/2} \xi^s w(\xi); \quad (62)$$

Z powyższych warunków (w ramkach) wynikają warunki na funkcję  $w(\xi)$ :

- $w(\xi)$  musi być regularna;
- $w(\xi)$  musi być skończona dla  $\xi = 0$ ;
- $w(\xi)$  musi rosnać wolniej od  $\exp$  dla  $\xi \rightarrow \infty$ .

Wstawiając Ansatz (62) do równania (61), po rachunkach na ok. pół strony, **ĆW – SPRAWDZIĆ** dostajemy równanie na  $w(\xi)$ :

$$\xi w'' + (2s + 1 - \xi)w' + nw = 0. \quad (63)$$

Jest to równanie na *konfluentną funkcję hipergeometryczną*. Znów darujemy tu sobie szersze przytoczenie wyników dotyczących tej funkcji. Idąc 'od tyłu', rozważmy funkcję  $F(\alpha, \gamma; y)$  zdefiniowaną przez szereg

$$F(\alpha, \gamma; y) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} y + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} y^2 + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)} y^3 + \dots, \quad (64)$$

gdzie  $\alpha, \gamma$  są parametrami, zaś  $y$  – argumentem, w ogólności zespolonym.

Jak ważna jest notacja, i jak łatwo się pomylić, gdy się za dużo znaczków naraz pęta.

Równoważnie zapiszemy  $F$  używając tzw. *symbolu Pochhammera*:

$$(\alpha)_0 = 1, \quad (\alpha)_1 = \alpha, \quad (\alpha)_2 = \alpha(\alpha+1), \quad \dots, \quad (\alpha)_k = \alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+k-1) \quad (65)$$

co można też wyrazić przez funkcję  $\Gamma$  Eulera (prosty dowód indukcyjny):

$$(\alpha)_k = \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)}.$$

Pozostając przy symbolach Pochhammera, mamy

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma; y) &= 1 + \frac{(\alpha)_1}{(\gamma)_1} \frac{1}{1!} y + \frac{(\alpha)_2}{(\gamma)_2} \frac{1}{2!} y^2 + \dots + \frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{1}{k!} y^k + \dots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{y^k}{k!} \end{aligned} \quad (66)$$

Funkcja  $F(\alpha, \gamma; y)$  spełnia równanie:

$$yF'' + (\gamma - y)F' - \alpha F = 0, \quad (67)$$

o czym się można przekonać przez bezpośrednie wstawienie:

$$\begin{array}{rcccccccc} F = & 1 & + \frac{(\alpha)_1}{(\gamma)_1} \frac{1}{1!} y & + \frac{(\alpha)_2}{(\gamma)_2} \frac{1}{2!} y^2 & + \frac{(\alpha)_3}{(\gamma)_3} \frac{1}{3!} y^3 + \dots & + \frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{1}{k!} y^k & + \dots \\ -\alpha F = & -\alpha & -\alpha \frac{(\alpha)_1}{(\gamma)_1} \frac{1}{1!} y & -\alpha \frac{(\alpha)_2}{(\gamma)_2} \frac{1}{2!} y^2 & -\alpha \frac{(\alpha)_3}{(\gamma)_3} \frac{1}{3!} y^3 + \dots & -\alpha \frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{1}{k!} y^k & + \dots \\ F' = & + \frac{(\alpha)_1}{(\gamma)_1} \frac{1}{1!} & + \frac{(\alpha)_2}{(\gamma)_2} \frac{1}{1!} y & + \frac{(\alpha)_3}{(\gamma)_3} \frac{1}{2!} y^2 + \dots & + \frac{(\alpha)_4}{(\gamma)_4} \frac{1}{3!} y^3 + \dots & + \frac{(\alpha)_{k+1}}{(\gamma)_{k+1}} \frac{1}{k!} y^k & + \dots \\ \gamma F' = & + \gamma \frac{(\alpha)_1}{(\gamma)_1} \frac{1}{1!} & + \gamma \frac{(\alpha)_2}{(\gamma)_2} \frac{1}{1!} y & + \gamma \frac{(\alpha)_3}{(\gamma)_3} \frac{1}{2!} y^2 + \dots & + \gamma \frac{(\alpha)_4}{(\gamma)_4} \frac{1}{3!} y^3 + \dots & + \gamma \frac{(\alpha)_{k+1}}{(\gamma)_{k+1}} \frac{1}{k!} y^k & + \dots \\ -yF' = & 0 & -\frac{(\alpha)_1}{(\gamma)_1} \frac{1}{1!} y & -\frac{(\alpha)_2}{(\gamma)_2} \frac{1}{1!} y^2 & -\frac{(\alpha)_3}{(\gamma)_3} \frac{1}{2!} y^3 + \dots & -\frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{1}{(k-1)!} y^k & + \dots \\ yF'' = & 0 & + \frac{(\alpha)_2}{(\gamma)_2} \frac{1}{1!} y & + \frac{(\alpha)_3}{(\gamma)_3} \frac{1}{1!} y^2 + \dots & + \frac{(\alpha)_4}{(\gamma)_4} \frac{1}{2!} y^3 + \dots & + \frac{(\alpha)_{k+1}}{(\gamma)_{k+1}} \frac{1}{(k-1)!} y^k & + \dots \end{array}$$

Czytelnik zechce sprawdzić znikanie członów przy potęgach 0, 1, 2, 3, a my sprawdzimy znikanie współczynnika przy  $y^k$ : Żywcem przepisując z ostatniej kolumny, mamy:

$$-\alpha \frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{1}{k!} + \gamma \frac{(\alpha)_{k+1}}{(\gamma)_{k+1}} \frac{1}{k!} - \frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_k} \frac{1}{(k-1)!} + \frac{(\alpha)_{k+1}}{(\gamma)_{k+1}} \frac{1}{(k-1)!} =$$

$$\frac{(\alpha)_k}{(\gamma)_{k+1}} \frac{1}{k!} \left( -\alpha(\gamma+k) + \gamma(\alpha+k) - k(\gamma+k) + (\alpha+k)k \right) = -\alpha\gamma - \alpha k + \gamma\alpha + \gamma k - k\gamma - k^2 + \alpha k + k^2 = 0.$$

Równanie (67), jako równanie drugiego rzędu, ma drugie liniowo niezależne rozwiązanie  $f_2$ . Okazuje się, że wyraża się ono też przez funkcję hipergeometryczną:

$$f_2 = y^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma - 1, 2 - \gamma; y)$$

Zachęcam Czytelnika, aby to sprawdził.

Dla nas teraz, z postaci (64), ważne jest wywnioskowanie, że:



- jeśli  $\alpha$  jest ujemną liczbą całkowitą, to szereg (64) urywa się na  $|\alpha|$ -tym wyrazie i rozwiązanie jest *wielomianem*.
- jeśli  $\alpha$  ma inną wartość, to szereg (64) dla dużych  $|y|$  zachowuje się jak eksponens, co prowadzi do niecałkowalnych rozwiązań. Okazuje się, że asymptotyczne zachowanie funkcji  $F(\alpha, \gamma; y)$  jest

$$F(\alpha, \gamma; y) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} y^{\alpha-\gamma} e^y \left( 1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{|y|}\right) \right).$$

Te i inne fakty są pokazane w wielu dobrych tekstach - p. np.[8].

Zakończymy tu konstatacją, że wiele funkcji, występujących w innych problemach mechaniki kwantowej, można wyrazić przez konfluentną funkcję hipergeometryczną. Tak jest np. z wielomianami Hermite'a i wielomianami Legendre'a.

Tak więc widzimy, że na ogół rośnie ona jak Exponens; ale dla wyjątkowych wartości  $n$ , będących *liczbami całkowitymi lub zerem*, rozwiązanie (63) jest *wielomianem*. **ĆW. Wypisać te wielomiany dla  $n = 0, 1, 2, 3$ .**

Pamiętajmy jednak, że  $n$  nie może być dowolne, muszą być bowiem spełnione równości (60); równania te można spełnić jedynie dla skończonej ilości  $n$ , dla tych mianowicie, dla których jest spełnione jest

$$\frac{\sqrt{2mA}}{\alpha h} > n + \frac{1}{2};$$

(tak, by  $s$ , określony przez (60), był dodatni). Ponieważ  $n$  musi być całkowite, więc widać, iż liczba poziomów musi być skończona.

Jeśli minimum jest dostatecznie płytkie, tzn. takie, że spełniona jest nierówność

$$\frac{\sqrt{2mA}}{\alpha h} < \frac{1}{2}$$

to stan związany w ogóle się nie pojawi.

Kilka pierwszych funkcji własnych jest na rysunkach **RYS**.

### 3.5 W dowolnym ujemnym potencjale zawsze istnieje stan związany

Okazuje się, że sytuacja opisana w Subsec. 3.2 jest typowa w wymiarze 1 i 2. Mianowicie, mamy

**Tw.** W dowolnym potencjale  $V(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  takim, że  $V(x) \leq 0$  dla każdego  $x \in \mathbb{R}$ , zawsze istnieje przynajmniej jeden stan związany.

*Uwaga.* Oznaczenie  $C_0^\infty(\mathbb{R})$  oznacza zbiór funkcji nieskończenie wiele razy różniczkowalnych i o zwartym nośniku (tzn. równych zero poza zbiorem domkniętym i ograniczonym). To założenie wprowadzamy ze względów technicznych, tak by mieć gwarancję, że funkcja falowa jest różniczkowalna dowolną ilość razy. Można klasę różniczkowalności znacznie obniżyć, ale nie będziemy tego robić.

**Dowód** jest prosty i opiera się na zasadzie wariacyjnej. Najsampierw, korzystając z tej zasady, pokażemy

**Lemat.** Niech dwa potencjały:  $V(x)$  oraz  $\tilde{V}(x)$  spełniają:

$$V(x) \leq \tilde{V}(x) \quad \text{dla dowolnego } x. \quad (68)$$

Wtedy energie stanów podstawowych  $E_0$  w potencjale  $V$  i  $\tilde{E}_0$  w potencjale  $\tilde{V}$  spełniają

$$E_0 \leq \tilde{E}_0. \quad (69)$$

**Dowód** lematu: Oznaczmy:  $\tilde{H} = T + \tilde{V}$ ,  $H = T + V$  (tu  $T$  jest operatorem energii kinetycznej:  $T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ ). Niech  $\tilde{\psi}_0$  będzie funkcją falową stanu podstawowego hamiltonianu  $\tilde{H}$ . Mamy wówczas:

$$(\tilde{\psi}_0, H\tilde{\psi}_0) \leq (\tilde{\psi}_0, \tilde{H}\tilde{\psi}_0) = \tilde{E}_0, \quad (70)$$

bo wartości średnie energii kinetycznej są takie same po obu stronach nierówności, i nierówność (70) wynika z nierówności (68) dla potencjałów.

Z zasady wariacyjnej mamy:

$$E_0 \leq (\tilde{\psi}_0, H\tilde{\psi}_0),$$

co dowodzi (69).

**KoniecDowoduLematu**

Teraz, weźmy dowolny potencjał taki  $V$ , jak w założeniu (tzn. wszędzie niedodatni). Zdefiniujmy dlań potencjał jamy prostokątnej  $V_{\square}$  tak, by dla dowolnego  $x \in \mathbb{R}$ , było:  $V_{\square} \leq V$ . Wiemy, że *dowolny* potencjał jamy prostokątnej posiada przynajmniej jeden stan związany, tzn. energia stanu podstawowego  $E_{\square}$  w tym potencjale jest mniejsza od zera. Wówczas z nierówności (69) widzimy, że w potencjale  $V$  energia stanu podstawowego jest mniejsza od  $E_{\square}$ .

**KoniecDowoduTwierdzenia**

*Uwaga.* Istotnym założeniem jest, aby potencjał  $V$  był niedodatni. Gdy tak nie będzie, to *może* on nie mieć stanów związanych – jak to widzieliśmy na przykładzie potencjału Morse'a.

## 4 Stany związane w $d = 3$ ; garść przykładów teoretycznych

### 4.1 Ruch w polu o symetrii sferycznej. Separacja zmiennych

Równanie Schrödingera wygląda tu podobnie jak uprzednio:

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (71)$$

gdzie tym razem jednak  $\Delta$  jest laplasjanem *trójwymiarowym*, (zaż  $x \in \mathbb{R}^3$ ).

Przepiszmy powyższe równanie podobnie, jak to już robiliśmy:

$$\Delta\psi(x) + \frac{2m}{\hbar}(E - V(x))\psi(x) = 0. \quad (72)$$

Przepiszmy teraz operator Laplace'a we współrzędnych *sferycznych*. (Było to, a przynajmniej powinno być, na Analizie II; jeśli nie to zachęcam mocno do samodzielnego przeliczenia **ĆW**). Wynik jest następujący:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right] + \frac{2m}{\hbar}(E - V(r))\psi(x) = 0. \quad (73)$$

Założyliśmy tutaj *sferyczną symetrię* potencjału; tak więc  $V$  zależy tylko od  $r$  (a nie zależy od kątów). Człony w nawiasie kwadratowym, zawierające pochodne po kątach  $\theta, \phi$ , to *operator kwadratu momentu pędu*. Nie będziemy o nim teraz więcej mówić, z wyjątkiem uwagi, że ze względu na symetrię sferyczną, *komutuje on z pełnym hamiltonianem*, tak więc stany stacjonarne można klasyfikować zgodnie z wartościami własnymi operatora momentu pędu – a są to dwie liczby kwantowe: Całkowita wartość momentu pędu  $l$  i jego rzut na wybraną oś, konwencjonalnie wybiera się tu oś  $z$ .

Jeśli operator momentu pędu określimy jako  $\hat{\mathbf{L}}^2$ , to mamy

$$-\frac{\hbar}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2}\psi\right] + V(r)\psi = E\psi. \quad (74)$$

Teraz: Zakładamy, że funkcja falowa od trzech zmiennych  $r, \theta, \phi$  daje się przedstawić jako *iloczyn* funkcji, z których jedna zależy tylko od promienia, a druga tylko od kątów. Konkretnie, zakładamy, że funkcja falowa jest postaci:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (75)$$

Funkcje  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  są funkcjami własnymi operatora  $\hat{\mathbf{L}}^2$ . Nazywają się one *funkcje kuliste*; istnieją algorytmy znalezienia ich jawnej postaci, ale my opuścimy tu ten aspekt. Nadmienimy jedynie, że okazuje się, że wartości własne i funkcje własne operatora  $\hat{\mathbf{L}}^2$  są

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}$$

Wstawiając teraz (75) do (74), dostaniemy równanie na funkcję radialną  $R(r)$ : (procedura jest analogiczna jak w  $d = 2$ )

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))R = 0. \quad (76)$$

Znajdźmy teraz postać funkcji radialnej. Okazuje się, że warto podstawić:

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}. \quad (77)$$

Po niezbyt długich rachunkach, dostaniemy z (76) równanie na  $\chi$ :

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left( \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi = 0. \quad (78)$$

Zbadajmy teraz, jaki warunek brzegowy (tu: asymptotykę w zerze) powinna spełniać funkcja  $\chi$ . Otóż, jeśli  $V(r)$  jest wszędzie skończona, to także i funkcja falowa powinna być wszędzie skończona; a to znaczy, że

$$\chi(0) = 0. \quad (79)$$

**Uwaga.** Tu niejawnie skorzystaliśmy z faktów, nie udowodnianych tutaj, ale dających się udowodnić na gruncie teorii eliptycznych równań różniczkowych cząstkowych. Jeden to argument powyżej: jeśli  $V(r)$  jest wszędzie skończona, to także i funkcja falowa powinna być wszędzie skończona. Drugi – ze szczególnym przypadkiem którego zetknęliśmy się wcześniej – to, że jeśli potencjał ma skończoną gładkość (jest klasy  $C^\alpha$ ), to funkcja ma gładkość o dwa większą ( $C^{\alpha+2}$ ).

Spójrzmy teraz na równanie na  $\chi$  (78). Ma ono postać identyczną, jak równanie jednowymiarowe, z efektywną energią potencjalną

$$V_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}; \quad (80)$$

ten ostatni człon można interpretować jako energię, pochodzącą od siły odśrodkowej.

## 4.2 Cząstka w studni potencjału

Tu potencjał zależy tylko od promienia  $r$ , i ma postać analogiczną do tej, która była w sytuacji jednowymiarowej:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{dla } |r| \leq a \\ U & \text{dla } |r| > a \end{cases} \quad (81)$$

Można tu znaleźć energie własne i funkcje własne dla dowolnej wartości momentu pędu; ale my ograniczymy się do przypadku *zerowego* momentu pędu, tzn.  $l = 0$ .

Równanie na część radialną (78) ma postać

$$\left( \frac{d^2\chi}{dr^2} + \omega^2 \right) \chi = 0 \quad \text{dla } |r| \leq a, \quad (82)$$

$$\left( \frac{d^2\chi}{dr^2} - \kappa^2 \right) \chi = 0. \quad \text{dla } |r| > a \quad (83)$$

gdzie:

$$\omega^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}E, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)$$

bardzo podobnie jak w jednym wymiarze... Ale tu mamy *jeden* warunek zszycia na granicy  $r = a$  – drugi warunek też jest, ale już uwzględniony – to regularność w zerze.

Funkcja falowa (już z uwzględnionymi warunkami: regularności oraz asymptotycznego dążenia do zera w nieskończoności) ma postać

$$\chi(r) = \begin{cases} A \sin \omega r & \text{dla } r \leq a \\ B e^{-\kappa r} & \text{dla } r > a \end{cases} \quad (84)$$

gdzie stałe  $A, B$  wyznaczamy z warunków zszycia, tzn. wymagania, aby wartości funkcji falowych z obszarów:  $r \leq a$  oraz  $r > a$  były równe dla  $r = a$ , plus ten sam warunek na pierwsze pochodne. Konkretnie, mamy:

$$\begin{cases} A \sin \omega a & = & B e^{-\kappa a} \\ A \omega \cos \omega a & = & B(-\kappa) e^{-\kappa a} \end{cases} \quad (85)$$

Warunki te można przeanalizować analogicznie jak w przypadku jednowymiarowym, (albo po prostu podzielić drugie równanie przez pierwsze) i dostać

$$\kappa = -\omega \operatorname{ctg} \omega a \quad (86)$$

znów dokładnie takie, jak w przypadku jednowymiarowym. Ale uwaga! Tam były dwie rodziny rozwiązań: 'tangensowa' i 'cotangensowa', a tu mamy *tylko tę drugą*.

Wprowadźmy, identycznie jak dla  $d = 1$ , zmienne bezwymiarowe  $\xi, \eta$  zamiast  $\omega, \kappa$  przez

$$\xi = a\omega, \quad \eta = a\kappa \quad (87)$$

i mamy

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 a & = & \frac{2mUa^2}{\hbar^2} \\ \eta & = & -\xi \operatorname{ctg} \xi \end{cases} \quad (88)$$

i wygodnie jest znów spojrzeć graficznie na proces rozwiązywania układu równań (88) **RYS.** Widzimy tu jednak różnicę jakościową w porównaniu z sytuacją jednowymiarową: Wskutek braku gałęzi 'tangensowej', istnieje zakres parametrów, dla których układ (88) *wcale nie ma rozwiązań*, tzn. nie ma stanów związanych. Konkretnie, jest tak, jeśli

$$\frac{2mUa^2}{\hbar^2} < \frac{\pi^2}{4} \quad (89)$$

**RYS.** – **rozpływanie się funkcji falowej przy dochodzeniu do warunku (89)** Jest to przejawem ogólnej sytuacji w trzech wymiarach: *w dostatecznie słabym potencjale nie ma stanów związanych*. Doprecyzowanie i szerszy komentarz są w następnej Subsection.

### 4.3 W $d = 3$ dla dostatecznie słabego potencjału nie ma stanów związanych

Zjawisko, które obserwowaliśmy wyżej, tzn. brak stanów związanych dla dostatecznie płytkiej trójwymiarowej jamy, jest ogólniejsze: okazuje się, że w  $d = 3$ , *dostatecznie płytki potencjał nie ma stanów związanych* – niezależnie od jego kształtu czy symetrii.

Pokazanie dowodu tego faktu ograniczymy tu do potencjałów sferycznie symetrycznych.

Dowód wynika z *oszacowania na liczbę stanów związanych w potencjale*. Istnieje sporo takich oszacowań, różniących się jakością (i trudnością dowodu), oraz zakresem stosowności. Zainteresowany czytelnik może zaznajomić się z tymi rzeczami w [7]. Tu przytoczymy dwa takie oszacowania.

Będziemy zakładać, że potencjał  $V(\mathbf{x})$  jest niedodatni (daje się to założenie rozluźnić), że jest gładki. Niech  $n(V)$  oznacza ilość stanów związanych w takim potencjale.

Ograniczymy się tu do sytuacji, gdy moment pędu jest równy zeru (gdy jest niezerowy, też można dostać różne oszacowania).

**Tw.** (Oszacowanie Bargmana).

$$n(V) \leq \int_0^\infty r|V(r)|dr. \quad (90)$$

**Tw.** (Oszacowanie Calogero). Jeśli ponadto  $V(r)$  jest monotoniczny, to

$$n(V) \leq \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \sqrt{|V(r)|}dr \quad (91)$$

Zanim przystąpimy do dowodu oszacowania Bargmana (Calogero zostawimy jako ćwiczenie), zobaczmy, jak z któregośkolwiek z tych oszacowań wynika fakt nieistnienia stanów związanych dla dostatecznie słabych potencjałów. Weźmy operator Schrödingera:

$$H_\lambda = T + \lambda V,$$

gdzie  $\lambda$  jest nieujemnym parametrem rzeczywistym. Widać od razu, że gdy weźmiemy którekolwiek z oszacowań (90) lub (91), to dla dostatecznie małego  $\lambda$  prawa strona nierówności będzie *mniejsza od 1* – co znaczy, że nie ma stanów związanych.

No to teraz będzie

**Szkic dowodu.** Będzie bowiem korzystane z różnych naturalnych, ale nieudowodnionych faktów; szczegółowe dowody można znaleźć np. w [7].

Punktem startowym będzie równanie (78) na radialną funkcję falową  $\chi(r)$  wraz z warunkiem (79). Zauważmy tu, że pochodna w zerze musi być różna od zera:  $\chi'(0) \neq 0$ .

Dowód będzie polegał na znalezieniu, a raczej oszacowaniu, ilości *zer funkcji*  $\chi$ , a to z kolei sprowadzi się do znalezienia/oszacowania ilości zer pochodnej  $\chi'(r)$ .

Dla funkcji  $\chi$  mamy równanie identyczne jak w jednym wymiarze, obowiązuje tam więc twierdzenie z tamtej sytuacji, mówiące o ilości węzłów: Mamy mianowicie,  $n$ -ta funkcja falowa ma  $n$  miejsc zerowych (nie liczymy tu zera w środku układu współrzędnych. Tzn.  $\chi_0$  dla stanu podstawowego nie ma węzłów,  $\chi_1$  ma jeden itd.; numeracja jak w języku C).

Popatrzmy teraz na równanie (78) na  $\chi$  dla różnych wartości energii  $E$ , nie tylko dla energii własnych. Typowe zachowanie dla dużych  $r$  to zachowanie *wykładnicze*, z dodatnim wykładnikiem.

Zbadamy zakres  $E$  od jakiejś wartości mniejszej od  $E_0$  aż do zera:  $E \in [E_0 - \epsilon, 0]$ ,  $\epsilon > 0$ .

Weźmy najspierw  $E < E_0$ . Funkcja  $\chi_0$  achowuje się jak na **RYS.**; dąży ona do nieskończoności (jeśli wystartowaliśmy z warunku  $\chi'(0) > 0$ ). W miarę wzrostu  $E$ , dla izolowanej wartości  $E_0$ , funkcja  $\chi_0$  dąży dla dużych  $r$  do zera, a dla  $E > E_0$  (i  $E < E_1$ ), zaczyna mieć jedno miejsce zerowe i dąży do  $-\infty$  (**RYS.**). Tak jest aż do  $E = E_1$ , gdzie  $\chi_1(r)$  dąży do zera, by potem, dla  $E > E_1$ , znów dążyć do nieskończoności (**RYS.**).

Opisane wyżej zachowanie było gołosłowne, ale można powyższy scenariusz udowodnić. (A kto się bawił metodą strzelania, to się przekona, że opisane wyżej zachowanie gołosłowne nie było).

Teraz, weźmy przypadek, gdy mamy skończoną ilość stanów związanych  $n$ , i weźmy zakres energii  $E_n < E \leq 0$ . Widzimy, że *ilość zer funkcji  $\chi_n$  jest taka sama jak funkcji dla  $E = 0$ ; zaś  $n$  jest po prostu ilością stanów związanych!*

Popatrzmy teraz na zera pochodnej. Z rysunku można wnosić, że ilość zer funkcji jest równa ilości zer pochodnej, a dokładniej, że jest mniejsza lub równa ilości zer pochodnej.

Okazuje się, że ilość zer pochodnej można oszacować. Należy w tym celu przejść od równania Schrödingera do równania Riccatiego, co niniejszym uczynimy.

Rozważamy więc równanie

$$-\chi''(r) + V(r)\chi(r) = 0, \quad (92)$$

gdzie przeskalowaliśmy zmienną  $r$  (bez zmiany nazwy) tak, by nie pałętały się tu stałe (tzn.  $r \rightarrow r \frac{\hbar^2}{2m}$ ).

Teraz zdefiniujemy

$$a(r) = \frac{\chi(r)}{\chi'(r)} - r \quad (93)$$

tam gdzie  $\chi'(r) \neq 0$ . Mamy więc:

$$\chi(r) = (a(r) + r)\chi'(r),$$

i przeliczamy dalej:

$$\begin{aligned} \chi'(r) &= (a'(r) + 1)\chi'(r) + (a(r) + r)\chi''(r) \\ &= \chi'(r) + a'(r)\chi'(r) + V(r)(a(r) + r)\chi(r) \\ &= \chi'(r) + a'(r)\chi'(r) + V(r)(a(r) + r)^2\chi'(r). \end{aligned}$$

Tak więc, jeśli  $\chi'(r) \neq 0$ , mamy

$$a'(r) = -V(r)(a(r) + r)^2; \quad (94)$$

równanie (94) to właśnie rzeczzone równanie Riccatiego.

Można spytać, czy nie była to zamiana w stylu 'zamienił stryjek siekierkę na kijek', bo wprawdzie obniżyliśmy o jeden rząd równania, ale równanie stało się *nieliniowe*. Uprzedzając nieco wypadki, powiemy, że taka zamiana się *opłaca*, bo po odrzuceniu określonych członów dodatnich, równanie przekształca się w nierówność (różniczkową), którą można odcałkować i otrzymać stąd oszacowanie na liczbę zer funkcji  $\chi(r)$ .

Ponieważ potencjał  $V$  jest niedodatni:  $V \leq 0$ , to wskutek (94)  $a'(r) > 0$ , zatem  $a(r)$  rośnie i staje się nieskończone w każdym zerze  $\chi'(r)$ . A ponieważ  $a(r)$  jest monotoniczna, to liczba *biegunów*  $a(r)$  jest dokładnie równa liczbie zer  $a(r) + r$  (p. **RYS.**), a to – w myśl (93) – jest równe liczbie zer funkcji  $\chi(r)$ . Tu wspomogliśmy się faktem, że  $\chi(r)$  oraz  $\chi'(r)$  nie mogą się jednocześnie zerować (dla  $r \neq 0$ ), bo równanie na  $\chi$  jest drugiego rzędu, więc gdyby gdzieś było:  $\chi(r) = \chi'(r) = 0$ , to  $\chi$  musiałoby być równe zeru wszędzie (z tw. o istnieniu i jednoznaczności rozwiązania).

Teraz, wprowadźmy pomocniczą funkcję  $b$ , wyrażającą się przez  $a$ ; na funkcję  $b$  otrzymamy najspierw równanie różniczkowe, a po odrzuceniu paru członów – nierówność różniczkową, którą następnie da się odcałkować. Konkretnie, weźmy:

$$b(r) = \frac{a(r)}{r}; \quad (95)$$

mamy:

$$b'(r) = \frac{a'(r)}{r} - \frac{a(r)}{r^2}$$

$$= -V \frac{(a+r)^2}{r} - \frac{a}{r^2} = -rV(b+1)^2 - \frac{b}{r}. \quad (96)$$

Dalej, mamy:  $b(0) = 0$ , ponieważ  $a(0) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{u(r)}{u'(r)} - r = 0$ , skąd wynika  $\lim_{r \rightarrow 0} b(r) = \lim_{r \rightarrow 0} a'(r) = 0$ , co wynika z (94). Zauważmy wreszcie, że bieguny  $b(r)$  pokrywają się dokładnie z biegunami  $a(r)$ , tak więc liczba biegunów  $b$  jest równa  $n(V)$ .

Założmy, że  $b$  ma zera w  $z_1 = 0 < z_2 < \dots < z_n$  i bieguny w punktach  $p_1 < p_2 < \dots < p_n$ , przy czym  $z_i < p_i < z_{i+1}$ . Tak więc  $b(r) > 0$  w każdym przedziale  $]z_i, p_i[$ , tak więc, odrzucając ostatni wyraz w (96), mamy:

$$b'(r) \leq -rV(b(r) + 1)^2,$$

lub

$$-\left[\frac{1}{1+b}\right]' \leq -rV(r) = r|V(r)|,$$

ponieważ  $V \leq 0$ . Całkując od  $z_i$  do  $p_i$ , otrzymamy:

$$1 = \int_{z_i}^{p_i} -\frac{d}{dr} \left( \frac{1}{1+b(r)} \right) \leq \int_{z_i}^{p_i} r|V(r)| dr.$$

A teraz! Sumując po  $i$ , mamy

$$n(V) \leq \sum_{i=1}^n \leq \int_{z_i}^{p_i} r|V(r)| dr \leq \int_0^\infty r|V(r)| dr, \quad (97)$$

o co chodziło.

**Koniec (szkicu) dowodu.**



## 5 Double wells

### 5.1 Powtórka z rozrywki: Jama potencjału i stany w niej związane

Przypomnijmy sobie obrazki, z których wnioskowaliśmy o ilości i energii stanów związanych w prostokątnej jamie potencjału. Obrazki te były bardzo sugestywne i klarowne; mają jednak jedną wadę. Mianowicie, kiepsko poddają się rozszerzeniu do bardziej skomplikowanych sytuacji – takich jak ta, którą się zaraz zajmujemy, a gdzie mamy do czynienia z dwiema studniami potencjału.

Aby od razu nie skakać na głęboką wodę, rozważmy raz jeszcze przypadek jamy prostokątnej. Warunki zszycia na funkcje w trzech obszarach prowadziły do układu 4 równań na 5 niewiadomych (4 współczynniki i energia – ukł (30)). Warunkiem istnienia nietrywialnego rozwiązania układu (30) było znikanie wyznacznika (31). Prowadzi to do równania (32), co stanowi równanie, z którego wyznaczamy dopuszczalne energie.

Podążymy teraz inną nieco drogą: Wystartujmy z wyrażenia na wyznacznik  $\mathcal{D}$ . Jest on funkcją energii oraz parametrów, tzn. głębokości jamy  $U$  oraz jej szerokości  $a$ :  $\mathcal{D}_{SW} \equiv \mathcal{D}(E; U, a)$ . Dla danych  $U$  oraz  $a$ , sporządźmy wykres funkcji  ${}_{SW}\mathcal{D}(E; U, a)$  i popatrzmy, gdzie ma ona zera. Będą to dopuszczalne energie układu.

Dla przypomnienia, mamy więc:

$$\mathcal{D}_{SW}e^{2\kappa a} = 2\omega\kappa \cos(2\omega a) + \kappa^2 \sin(2\omega a) - \omega^2 \sin(2\omega a)$$

gdzie przypomnijmy oznaczenia:

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}}, \omega = \sqrt{\frac{2m(E)}{\hbar^2}}. \quad (98)$$

Bierzemy takie jednostki, że  $\hbar = 1$ ,  $2m = 1$ ; no i robimy wykres, w zakresie  $E$  od 0 do  $U$ .

Na **RYS.** mamy wykres  $\mathcal{D}_{SW}e^{2\kappa a}$  dla  $U = 1$ ,  $a = 5$ . (Czynnik  $e^{2\kappa a}$  jest dla wygody – na zera wyznacznika nie ma wpływu). Nie liczy się pierwsze zero (tzn. dla  $E = 0$ ), bo tam  $\mathcal{D}_{SW}$  zawsze ma zero. Z rysunku widać, że mamy 4 stany związane o energiach 0.07; 0.23; 0.6; 0.96.

### 5.2 Prostokątna jama podwójna (double well). Struktura dwóch najniżej leżących poziomów

Rozważmy tu przykład nie najogólniejszy, ale zawierający wszystkie co trzeba aspekty dotyczące double well (przynajmniej jeśli chodzi o przypadek symetryczny; asymetryczny zostawimy na później).

Setup będzie analogiczny jak dla pojedynczej studni prostokątnej – see 3.2. Niech  $0 \leq a < b$ . Potencjał  $V(x)$  jest określony przez:

$$V(x) = \begin{cases} U & \text{dla } x < -b & \text{obszar I} \\ 0 & \text{dla } -b \leq x < -a & \text{obszar II} \\ U & \text{dla } -a \leq x < a & \text{obszar III} \\ 0 & \text{dla } a \leq x < b & \text{obszar II'} \\ U & \text{dla } b < x & \text{obszar I'} \end{cases} \quad (99)$$

(see **RYS.**). Funkcja falowa w poszczególnych obszarach da się napisać analogicznie jak w przypadku pojedynczej jamy prostokątnej, see 3.2. Konkretnie, mamy (z rozpędu

wypiszemy od razu pochodne):

$$\begin{aligned}
\psi_I(x) &= Ae^{\kappa x}, & \psi'_I(x) &= \kappa Ae^{\kappa x}, \\
\psi_{II}(x) &= B \sin \omega x + C \cos \omega x, & \psi'_{II}(x) &= \omega B \cos \omega x - \omega C \sin \omega x, \\
\psi_{III}(x) &= D \sinh \kappa x + F \cosh \kappa x, & \psi'_{III}(x) &= \kappa D \cosh \kappa x + \kappa C \sinh \kappa x, \\
\psi_{II'}(x) &= B' \sin \omega x + C' \cos \omega x, & \psi'_{II'}(x) &= \omega B' \cos \omega x - \omega C' \sin \omega x, \\
\psi_{I'}(x) &= A' e^{-\kappa x}, & \psi'_{I'}(x) &= -\kappa A' e^{-\kappa x},
\end{aligned} \tag{100}$$

Stałe:  $A, B, C, D, F, B', C', A'$  (taką ustalamy kolejność zmiennych) wyznaczymy z warunków zszycia (równości funkcji oraz pochodnych na granicach między obszarami). Wypisywanie tych równości jest cokolwiek nudne, więc – ponieważ wiadomo, co się robi – darujemy to sobie. Wynikiem jest układ równań liniowych na współczynniki  $A, B, C, D, F, B', C', A'$ . Jest to układ *jednorodny*, więc dla istnienia nietrywialnego rozwiązania, musi zniknąć wyznacznik  $D_{DW}$  tegoż układu, tzn. musi zachodzić  $D_{DW} = 0$ , gdzie::

$$D_{DW} = \begin{vmatrix} e^{-\kappa b} & \sin(\omega b) & -\cos(\omega b) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \kappa e^{-\kappa b} & -\omega \cos(\omega b) & -\omega \sin(\omega b) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin(\omega a) & \cos(\omega a) & \sinh(\kappa a) & -\cosh(\kappa a) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega \cos(\omega a) & \omega \sin(\omega a) & -\kappa \cosh(\kappa a) & \kappa \sinh(\kappa a) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sinh(\kappa a) & \cosh(\kappa a) & -\sin(\omega a) & -\cos(\omega a) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \kappa \cosh(\kappa a) & \kappa \sinh(\kappa a) & -\omega \cos(\omega a) & \omega \sin(\omega a) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sin(\omega b) & \cos(\omega b) & -e^{-\kappa b} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega \cos(\omega b) & -\omega \sin(\omega b) & \kappa e^{-\kappa b} \end{vmatrix} \tag{101}$$

Powyżej mamy dla  $\kappa$  i  $\omega$  te same oznaczenia, co , i w pojedynczej jamie, tzn. wzór (98).

Weźmy do analizy, zamiast czystego wyznacznika,

$$\mathcal{D}_{DW} = D_{DW} e^{2\kappa b} \tag{102}$$

żeby pozbyć się niepotrzebnie dużego czynnika.

Darujemy sobie wypisywanie wyrażenia na  $\mathcal{D}_{DW}(E; a, b, U)$ , danego przez (102) (podobnie jak Al w Toy Story 2). Do wypisania wyrażenie na  $\mathcal{D}_{DW}(E; a, b, U)$  potrzeba ponad 2 ekranów, a w tym momencie nie potrzebujemy od niego niczego prócz wykresu  $\mathcal{D}_{DW}(E)$  dla kilku wybranych wartości parametrów  $a, b, U$ .

Przede wszystkim sprawdzimy, że odtwarzają się energie dla jamy pojedynczej, gdy weźmiemy  $a = 0$ . Na rys. **RYS.** mamy wykres  $\mathcal{D}_{DW}(E; 0, 5, 1)$ . Widać, że energie stanów związanych są takie same jak w pojedynczej studni. (*Uwaga:* Wyrażenia na  $\mathcal{D}_{DW}(E; 0, 5, 1)$  oraz  $e^{2\kappa} \mathcal{D}_{SW}(E; 5, 1)$  nie są identyczne – różnią się czynnikiem  $\sqrt{E(U - E)}$ , który jednak nie ma wpływu na położenie zer).

Dla wątej bariery, nic specjalnego się nie dzieje (**RYS.:**  $a = 0.5, b = 5, U = 1$ ), jedynie poziomy energetyczne trochę się przesuwają.

Natomiast, gdy bariera robi się już dobrze gruba (**RYS.:**  $a = 3, b = 8, U = 1$ ), obserwujemy, że poziomy energetyczne *układają się w pary*; w każdej parze różnice energii są bardzo małe (najmniejsze dla stanów 0 i 1, większe dla 2 i 3 itd).

Przyjrzyjmy się też tu funkcjom falowym. Weźmy tu stan podstawowy i pierwszy stan wzbudzony. (**RYS.**) Widać, że funkcje falowe są dobrze zlokalizowane wewnątrz każdej jamy. Ponadto, funkcja stanu podstawowego jest *symetryczna*, zaś pierwszego stanu

wzbudzonego – *antysymetryczna* (pierwsza nie ma węzłów, druga ma jeden węzeł – wiemy o tym skądinąd, bo mówi o tym tw. oscylacyjne). Widać też, że w barierze pomiędzy jamami funkcja jest bardzo mała. Ponadto, w obu studniach, funkcje  $\psi_0$  oraz  $\psi_1$  są *bardzo bliskie* (w jednej z części różnią się oczywiście znakiem).

## 5.3 Dynamika – tunelowanie cząstki

### 5.3.1 Dynamika układu dwustanowego

A teraz! Rozpatrzmy problem *dynamiczny*. Może się to wydawać znaczącym skokiem w bok, bo od Sec. 1 zajmujemy się tylko równaniem stacjonarnym. Ale tu analiza będzie prosta.

Jako przestrzeń stanów weźmy tu jedynie podprzestrzeń rozpinaną przez funkcje  $\psi_0$  i  $\psi_1$ . Dowolna funkcja z tej podprzestrzeni jest liniową kombinacją funkcji  $\psi_0$  i  $\psi_1$ . W dowolnej chwili czasu możemy więc napisać:

$$\psi(t, x) = a_0(t)\psi_0(x) + a_1(t)\psi_1(x). \quad (103)$$

W takiej postaci wstawmy funkcję falową do równania Schrödingera z czasem. Mamy (poniżej dot oznacza pochodną po czasie):

$$i\hbar\dot{\psi} = i\hbar(\dot{a}_0\psi_0 + \dot{a}_1\psi_1) = H(a_0\psi_0 + a_1\psi_1) = a_0E_0\psi_0 + a_1E_1\psi_1. \quad (104)$$

Jeśli teraz pomnożymy powyższe równanie przez  $\psi_0$  i wyciąkujemy po zmiennych przestrzennych (tzn. weźmiemy *iloczyn skalarny* z wektorem wzdłuż osi 0), to dostaniemy:

$$i\hbar\dot{a}_0 = E_0a_0;$$

Analogicznie dla  $a_1$ :

$$i\hbar\dot{a}_1 = E_1a_1.$$

Można od razu te równania scałkować i mamy:

$$\begin{cases} a_0(t) &= e^{-iE_0t/\hbar}a_0(0), \\ a_1(t) &= e^{-iE_1t/\hbar}a_1(0). \end{cases} \quad (105)$$

*Uwaga.* W opisany wyżej sposób można otrzymać ewolucję czasową *dowolnego* układu skończeniowymiarowego, nie tylko dwustanowego.

### 5.3.2 Ewolucja czasowa cząstki w podwójnej symetrycznej jamie

Pamiętajmy tu, jak zachowują się funkcje własne  $\psi_0$  (o energii  $E_0$ ), oraz  $\psi_1$  (o energii  $E_1$ ). (tzn. ważny aspekt to: Moduły funkcji falowych w obu jamach są bardzo bliskie). Weźmy teraz ich *kombinacje liniowe*, określone poniżej (zakładamy tu, że  $\psi_0$  jest wszędzie dodatnia, zaś  $\psi_1$  jest dodatnia w lewej jamie):

$$\psi_L = \psi_0 + \psi_1, \quad \psi_R = \psi_0 - \psi_1; \quad (106)$$

$\psi_L$  jest prawie całkowicie zlokalizowana w lewej jamie, zaś  $\psi_R$  – w prawej jamie. Powiedzenie: 'prawie całkowicie zlokalizowana' możemy doprecyzować, licząc całkę z kwadratu funkcji falowej dla  $x < 0$  oraz  $x > 0$ ).

*Uwaga:* Funkcje  $\psi_L$ ,  $\psi_R$  nie są unormowane, ale ten aspekt jest w tej chwili nieistotny.

Weźmy teraz  $\psi_L$  za stan początkowy i rozpatrzmy ewolucję takiego układu.

Mamy, dla funkcji  $\psi_L$ :  $a_0(0) = a_1(0) = 1$ , i patrząc na ewolucję zadaną wzorem (105), mamy:

$$\psi(t) = e^{-iE_0t/\hbar}\psi_0 + e^{-iE_1t/\hbar}\psi_1.$$

Aby dokładniej zorientować się w zależności czasowej funkcji  $\psi(t)$ , wyłączmy z niej czynnik fazowy; mamy w ten sposób:

$$\psi(t) = e^{-iE_0t/\hbar} (\psi_0 + e^{-i\Delta Et/\hbar}\psi_1), \quad (107)$$

gdzie oznaczyliśmy przez  $\Delta E$  rozszczepienie poziomów:

$$\Delta E = E_1 - E_0. \quad (108)$$

Widzimy, że (modulo nieistotny czynnik fazowy) funkcja falowa będzie 'przelewała się' z jednej jamy do drugiej. Charakterystyczny czas takiego procesu tunelowania będzie określony przez stałą w wykładniku; gdy czas  $t$  przyjmie wartość  $T$ , równą

$$\frac{\Delta E}{\hbar}T = \pi, \quad (109)$$

to funkcja falowa będzie miała postać:  $\psi(T) = \psi_0 - \psi_1 = \psi_R$ , tzn. cząstka będzie (z bardzo dobrym przybliżeniem) zlokalizowana w prawej jamie.

Na filmiku wygląda to następująco:

**FILMIK**

### 5.3.3 Gdy jama jest niesymetryczna...

A co będzie, gdy jamy będą *niesymetryczne*?

Cóż, tu traci się prostotę obrazka.

Przede wszystkim, przyjrzyjmy się funkcjom falowym. Dla ustalenia uwagi weźmy potencjał, w którym studnie mają jednakową szerokość, ale dno jednej ze studni (powiedzmy, prawa) leży *niewielko* niżej od dna lewej. **RYS.** Wystarczy tu *bardzo niewielka różnica* energii 'denek', aby spowodować *prawie całkowite zlokalizowanie* funkcji falowej stanu podstawowego w niższej z połówek. **RYS.**

W tej sytuacji, trudno będzie zbudować funkcję zlokalizowaną w lewej połowce. Trzeba do tego wziąć dużą ilość funkcji własnych. W efekcie, ruch ma charakter 'quasi-periodyczny', a obserwując go gołym okiem, dostrzegamy raczej chaos **FILMIK**. Statystycznie rzecz biorąc, większość funkcji falowej pozostaje zlokalizowana w lewej studni, ale z dużymi i szybkimi, chaotycznymi fluktuacjami.

*Może być jednak wyjątek!* A mianowicie, gdy jama będzie na tyle asymetryczna, że pojawi się sytuacja, gdy będą bardzo bliskie energie nie  $E_0$  i  $E_1$  (jak w jamie symetrycznej), tylko  $E_1$  i  $E_2$ . Odpowiada temu sytuacja, gdy w lewej jamie mamy stan bez węzłów, a w prawej z jednym węzłem; i sytuacja bardzo przypomina tę, którą znamy z jamy symetrycznej. **RYS.**

Zastosowania do magnetyków molekularnych.

## 6 Rozpraszanie w $d = 1$

### 6.1 Ogólniki. Macierz $M$

Setup, (czyli tu: postawienie problemu) jest następujące. Mamy *centrum rozpraszania*, czyli potencjał; zakładamy o nim, że jest funkcją o nośniku zwartym. Na centrum pada z lewej strony fala o amplitudzie  $A$  i wektorze falowym  $k$ . Energia jest większa od zera, więc  $k$  jest rzeczywiste (później opłaca się założyć, że energia oraz  $k$  przyjmują wartości zespolone...) Poza nośnikiem funkcji ma więc ona postać  $\psi_{\text{in}}^L = Ae^{ikx}$ . Podobnie, pada fala z prawej strony; zapisujemy ją jako  $\psi_{\text{in}}^R = De^{-ikx}$ . Fale te częściowo przechodzą przez barierę (być może całkowicie, a być może wcale), a częściowo odbijają się (**RYS.**).

Mamy więc po lewej stronie bariery:  $\psi^L = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ , po prawej zaś  $\psi^R = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ . Dwa z tych współczynników wyrażają się przez pozostałe. Zażądajmy np. aby  $\psi^L$  wyrażało się przez  $\psi^R$ . Znaczy to, że  $A, B$  mają być kombinacją liniową współczynników  $C, D$ , co zapiszmy w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}, \quad (110)$$

co definiuje *macierz rozpraszania*  $M$ . Wyznamy ją przez rozwiązanie równania Schrödingera.

Powyższy setup nie jest jedynym możliwym. Niedługo zetkniemy się z równoważnym postawieniem problemu, kiedy chcemy opisać falę *wychodzącą*  $\psi_{\text{out}} = Be^{-ikx} + Ce^{ikx}$  jako funkcję fali wchodzącej  $\psi_{\text{in}} = Ae^{ikx} + De^{-ikx}$ . Będzie to w Subsec. 6.3.

### 6.2 Rozpraszanie na prostokątnych: garbie i jamie potencjału

Rozważmy teraz rozpraszanie na prostokątnym garbie potencjału (**RYS.**). Potencjał  $V(x)$  jest równy:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } |x| \geq a \\ U & \text{dla } |x| < a \end{cases} \quad (111)$$

Na razie weźmiemy  $U > 0$ .

#### 6.2.1 Przypadek $E > U$

Rozważmy tu przypadek, gdy  $E > U$ ; przypadek, gdy  $0 < E < U$  rozważa się bardzo podobnie.

Naszym celem jest obliczenie macierzy  $M$ , a z niej – współczynników przejścia i odbicia. Zrobimy to przez wyznaczenie funkcji falowej z równania Schrödingera. Mamy, w poszczególnych oczywistych obszarach:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{dla } x < -a \quad (\text{obszar I}) \\ Ge^{ik'x} + Fe^{-ik'x} & \text{dla } -a < x < a \quad (\text{obszar II}) \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{dla } x > a \quad (\text{obszar III}) \end{cases} \quad (112)$$

gdzie:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - U)}{\hbar^2}} \quad (113)$$

Stałe  $A, B, C, D, G, F$  wyznaczamy z warunków zszycia, tzn. warunków równości funkcji oraz jej pochodnej na granicach między obszarami.

I tak, **na granicy I/II** mamy równości:

$$\begin{cases} Ae^{-ika} + Be^{+ika} & = & Ge^{-ik'a} + Fe^{+ik'a} \\ ikAe^{-ika} - ikBe^{+ika} & = & ik'Ge^{-ik'a} - ik'Fe^{+ik'a} \end{cases} \quad (114)$$

Chcemy wyrazić współczynniki  $A, B$  jako funkcje współczynników  $G, F$ . Układ (114) jest układem równań liniowych, który rozwiązuje się standardowo. Widać, że  $A, B$  wyrażają się przez  $G, F$  *liniowo*, co zapiszemy w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{2k} \underbrace{\begin{bmatrix} e^{i(k-k')a}(k+k') & e^{i(k+k')a}(k-k') \\ e^{-i(k+k')a}(k-k') & e^{i(k-k')a}(k+k') \end{bmatrix}}_{\equiv P} \begin{bmatrix} G \\ F \end{bmatrix} \quad (115)$$

Analogicznie, **na granicy II/III** mamy warunki zszycia:

$$\begin{cases} Ge^{+ik'a} + Fe^{-ik'a} & = & Ce^{+ika} + De^{-ika} \\ ik'Ge^{+ik'a} - ik'Fe^{-ik'a} & = & ikCe^{ika} - ikDe^{-ika} \end{cases} \quad (116)$$

skąd wyznaczamy współczynniki  $G, F$  jako funkcje  $C, D$  i wynik zapiszemy znów w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} G \\ F \end{bmatrix} = \frac{1}{2k'} \underbrace{\begin{bmatrix} e^{i(k-k')a}(k+k') & e^{-i(k+k')a}(k'-k) \\ e^{i(k+k')a}(k'-k) & e^{-i(k-k')a}(k+k') \end{bmatrix}}_{\equiv P'} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (117)$$

co definiuje macierz  $P'$ .

Wprowadźmy oznaczenia:

$$\epsilon = e^{ika}, \quad \epsilon' = e^{ik'a} \quad (118)$$

Wtedy mamy

$$P = \frac{1}{2k} \begin{bmatrix} \epsilon\epsilon'^{-1}(k+k') & \epsilon\epsilon'(k-k') \\ \epsilon^{-1}\epsilon'^{-1}(k-k') & \epsilon^{-1}\epsilon'(k+k') \end{bmatrix}, \quad (119)$$

$$P' = \frac{1}{2k'} \begin{bmatrix} \epsilon\epsilon'^{-1}(k+k') & -\epsilon^{-1}\epsilon'^{-1}(k-k') \\ -\epsilon\epsilon'(k-k') & \epsilon^{-1}\epsilon'(k+k') \end{bmatrix} \quad (120)$$

Wyrazimy  $A, B$  jako funkcje  $C, D$ , (tzn. – zgodnie z (110) – wyznaczmy macierz  $M$ ), jeśli pomnożymy macierze  $P$  oraz  $P'$ . Tzn. mamy:

$$M = P \cdot P' = \frac{1}{4kk'} \begin{bmatrix} \epsilon^2[(k+k')^2\epsilon'^{-2} - (k-k')^2\epsilon'^2] & (k+k')(k-k')(\epsilon'^2 - \epsilon'^{-2}) \\ (k+k')(k-k')(\epsilon'^2 - \epsilon'^{-2}) & \epsilon^{-2}[(k+k')^2\epsilon'^2 - (k-k')^2\epsilon'^{-2}] \end{bmatrix} \quad (121)$$

Po kilku przekształceniach (nieco pracochłonnych ale technicznie banalnych) otrzymujemy następującą postać macierzy  $M$ :

$$M = P \cdot P' = \begin{bmatrix} (\cos 2k'a - iK_+ \sin 2k'a)e^{2ika} & iK_- \sin 2k'a \\ -iK_- \sin 2k'a & (\cos 2k'a + iK_+ \sin 2k'a)e^{-2ika} \end{bmatrix} \quad (122)$$

gdzie oznaczyliśmy

$$K_+ = \frac{k^2 + k'^2}{2kk'}, \quad K_- = \frac{k^2 - k'^2}{2kk'}. \quad (123)$$

Zwróćmy uwagę (przez policzenie), że  $\det M = 1$ .

Teraz!! Obliczmy współczynnik przejścia. Przypominając sobie wzór (110), liczymy:

$$T = \left| \frac{\det M}{M_{11}} \right|^2 = \frac{1}{1 + K_-^2 \sin^2 2k'a}. \quad (124)$$

zaś współczynnik odbicia jest równy

$$\left| \frac{M_{12}}{M_{11}} \right|^2 = \frac{K_-^2 \sin^2 2k'a}{1 + K_-^2 \sin^2 2k'a}; \quad (125)$$

widzimy, że  $R + T = 1$  – jako i być powinno.

Powyższe wzory są prawdziwe zarówno dla  $U > 0$  ('garb' potencjału), jak i  $U < 0$  ('jama' potencjału).

Wykresy współczynnika przejścia jako funkcji energii są na **RYS. RYS. RYS..** (dla garbów i jam).

Patrząc na **RYS.** (dla głębokiej i szerokiej jamy), zwróćmy uwagę, przy jakich energiach współczynnik przejścia ma wartość 1. Niech Czytelnik spróbuje to skojarzyć z energiami stanów związanych w jamie o tejże głębokości... **RYS...** Nie jest to zbieżność przypadkowa – zbadamy ją w następnej Subsection.

### 6.2.2 Przypadek $E < U$

Ale uprzednio, skompletujmy jeszcze wyniki, licząc przypadek  $E < U$ ,  $E > 0$ . Możemy powtórzyć całe postępowanie powyżej, z tą tylko różnicą, że w obszarze II funkcja falowa opisywana jest przez Exponensy od argumentu *rzeczywistego*, (lub funkcje hiperboliczne), a nie *urojonego*. Postąpimy jednakże inaczej, mianowicie, nadając zmiennej  $k'$  (rzeczywistej dla  $E > U$  wartość *urojoną* (dla  $E < U$ ). Konkretnie, dla  $E - U$  mamy:

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - U)}{\hbar^2}} = i\sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}}; \quad \text{nazwijmy: } \kappa = \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}} \quad (126)$$

i mamy, dla  $E - U$ :

$$k' = i\kappa.$$

Przepiszmy teraz wielkości  $K_+$ ,  $K_-$ :

$$K_+ = \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} = -i\frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa} \equiv -i\mathcal{K}_+, \quad K_- = \frac{k^2 - k'^2}{2kk'} = -i\frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa} \equiv -i\mathcal{K}_-. \quad (127)$$

Przypominając sobie dalej, jak wyglądają funkcje trygonometryczne od argumentu urojonego:

$$\sin ix = i \sinh x, \quad \cos ix = \cosh x$$

mamy:

$$M = \begin{bmatrix} (\cosh 2\kappa a - i\mathcal{K}_+ \sinh 2\kappa a)e^{2ika} & i\mathcal{K}_- \sinh 2\kappa a \\ -i\mathcal{K}_- \sinh 2\kappa a & (\cosh 2\kappa a + i\mathcal{K}_+ \sinh 2\kappa a)e^{-2ika} \end{bmatrix} \quad (128)$$

Jak i uprzednio,  $\det M = 1$ , zaś na współczynnik przejścia mamy

$$T = \left| \frac{\det M}{M_{11}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \mathcal{K}_-^2 \sinh^2 2\kappa a}. \quad (129)$$

Przykładowe wykresy współczynnika przejścia jako funkcji energii dla dwu jam są na **RYS. RYS..** [TE SAME WARTOŚCI PARAMETRÓW CO UPRZEDNIO]. Widać, że tu współczynnik przejścia zachowuje się w sposób znacznie mniej ciekawy niż dla przypadku  $E > U$ .

## 6.3 Macierz $S$ i jej bieguny a stany związane

### 6.3.1 Macierz $S$ a macierz $M$

Często okazuje się wygodniejsze rozważanie macierzy  $S$  zamiast macierzy  $M$ . Jak pamiętamy, macierz  $M$  była określona przez

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}.$$

Macierz  $S$  jest zdefiniowana przez

$$\begin{bmatrix} C \\ B \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A \\ D \end{bmatrix}.$$

Interpretacja  $S$  jest prosta: Fale  $Ce^{ikx}$  z prawej strony potencjału oraz  $Be^{-ikx}$  z lewej strony to fale *odchodzące* od centrum rozpraszającego, zaś  $Ae^{ikx}$  i  $De^{-ikx}$  to fale *przychodzące* do centrum. Zatem  $S$  określa falę rozproszoną jako funkcję fali padającej.

W  $d = 1$  jest wszystko jedno, czy rozważamy macierz  $M$  czy macierz  $S$ ; natomiast w dwu lub trzech wymiarach to macierz  $S$  jest najbardziej naturalnym obiektem i tam się ją rozpatruje jako obiekt podstawowy.

Wróćmy do  $d = 1$ . Łatwo wyrazić macierz  $S$  przez macierz  $M$ , pamiętając definicję tej ostatniej:

$$S = \frac{1}{M_{11}} \begin{bmatrix} 1 & -M_{12} \\ M_{21} & \det M \end{bmatrix}$$

### 6.3.2 Gdzie macierz $S$ ma bieguny dla jamy

Korzystając z tego, wypiszmy macierz  $S$  odpowiadającą macierzy  $M$  dla rozpraszania na *jamie* potencjału (122), tzn. rozważamy przypadek  $U < 0$ . Mamy:

$$S = \frac{e^{-2ika}}{\cos 2k'a - iK_+ \sin 2k'a} \begin{bmatrix} 1 & -iK_- \sin 2k'a \\ -iK_- \sin 2k'a & 1 \end{bmatrix} \quad (130)$$

Poszukajmy biegunów macierzy  $S$ . Rozważajmy macierz  $S$  jako funkcję zmiennej zespolonej  $k$ . Widać, że jeśli one istnieją, to musi się tam zerować mianownik czynnika przed macierzą, tzn. musi zachodzić

$$\cos 2k'a - iK_+ \sin 2k'a = 0. \quad (131)$$

Najprostszy jest przypadek, gdy lewa strona powyższej równości jest czysto rzeczywista, tzn. gdy  $K_+$  jest czysto urojone. Przypominając sobie definicje  $k$  i  $k'$ , tzn. (113) widzimy, że zachodzi to w przypadku, gdy  $U < E < 0$ . Oznaczmy wtedy:

$$k = i\kappa, \quad \text{gdzie} \quad \kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

i wtedy

$$K_+ = \frac{k'^2 - \kappa^2}{2ik'\kappa}$$

i warunek (131) przyjmuje postać

$$\cos 2k'a = \frac{k'^2 - \kappa^2}{2k'\kappa} \sin 2k'a,$$



a po przekształceniu

$$2k'\kappa \cos 2k'a + \kappa^2 \sin 2k'a - k'^2 \sin 2k'a = 0,$$

w czym rozpoznajemy dokładnie warunek (32) na wartości własne dla cząstki w jamie potencjału (tam było oznaczenie  $\omega$  na  $k'$ ).

Mamy więc morał:

*Bieguny macierzy  $S$  na czysto urojonej osi pędów odpowiadają stanom związanym.*

Jest to bardzo ogólna własność macierzy  $S$ .

## **6.4 Macierz $S$ – cd.; jej bieguny nie czysto urojone a rezonanse**

### **6.4.1 Rezonanse w jamie prostokątnej**

### **6.4.2 Jama z barierami: stany związane...**

### **6.4.3 ...i rezonanse**

## 7 Cząstka w potencjale periodycznym

### 7.1 Struktura funkcji falowej

Załóżmy, że potencjał  $V(x)$  jest funkcją *periodyczną* o okresie  $a$ , tzn. że dla dowolnego  $x$  zachodzi

$$V(x+a) = V(x).$$

Rozważmy naturalnie pojawiający się w tej sytuacji *operator translacji*  $T_a$  o odcinek (właściwie: wektor)  $a$ ; dokładniej, dla dowolnej funkcji  $f$  zachodzi

$$(T_a f)(x) = f(x+a). \quad (132)$$

Okazuje się, że łatwo można wyrazić  $T_a$  przez operator różniczkowania (przynajmniej w działaniu na funkcje analityczne):

$$T_a = e^{aD}, \quad (133)$$

gdzie  $D = \frac{d}{dx}$ . Mamy bowiem, korzystając z rozwinięcia w szereg Taylora:

$$(T_a f)(x) = f(x) + af'(x) + \frac{1}{2!}a^2 f''(x) + \frac{1}{3!}a^3 f'''(x) + \dots = (e^{aD} f)(x).$$

Stąd łatwo zobaczyć, że operator  $T_a$  komutuje z hamiltonianem. Oczywiście jest bowiem, że operatory  $T_a$  oraz  $V$  komutują (dzięki periodyczności  $V$ ). Równie oczywiste, z zapisu (133) jest, że komutują  $T_a$  oraz operator energii kinetycznej.

Następną własnością operatora  $T_a$  jest to, iż jest on *unitarny*. Mamy bowiem, dla dowolnych funkcji  $f, g$  z przestrzeni stanów:

$$(T_a f, T_a g) = (f, g) \equiv (\text{Id} f, g)$$

dzięki temu, że argumenty  $f$  oraz  $g$  zostały przesunięte o tę samą wartość; z drugiej zaś strony

$$(T_a f, T_a g) = (T_a^\dagger T_a f, g) = (\text{Id} f, g)$$

tzn.  $T_a^\dagger T_a = \text{Id}$  – a to jest właśnie warunek unitarności operatora.

Skoro operator  $T_a$  komutuje z  $H$ , to mają one wspólny układ funkcji własnych:

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi \\ T_a\psi &= \lambda\psi \end{aligned} \quad (134)$$

Może Czytelnik przypomina sobie fakt (do znalezienia w książkach z algebry liniowej), że skoro operator jest unitarny, to jego wartości własne muszą leżeć na okręgu jednostkowym. Tak więc możemy zapisać

$$\lambda = e^{i\lambda}, \quad \text{gdzie } \lambda \in \mathbb{R}$$

i, bez utraty ogólności, możemy zapisać

$$\lambda = e^{ika}, \quad (135)$$

gdzie, aby związek  $\lambda \leftrightarrow k$  był jednoznaczny, bierzemy

$$k \in [-\pi, \pi[.$$

Niech  $\psi(x)$  będzie funkcją własną  $H$ . Zdefiniujmy funkcję  $u(x)$  wzorem

$$u(x) = e^{-ikx}\psi(x). \quad (136)$$

Mamy, wykorzystując definicję operatora  $T_a$  oraz wyrażenie (135)

$$\begin{aligned} u(x+a) &= T_a u(x) = T_a(e^{-ikx}\psi)(x) = e^{-ik(x+a)}\psi(x+a) \\ &= e^{-ik(x+a)}T_a\psi(x) = e^{-ik(x+a)}e^{ika}\psi(x) = e^{-ikx}\psi(x) = u(x); \end{aligned} \quad (137)$$

widzimy, że  $u(x)$  jest funkcją *periodyczną* o okresie  $a$ . Zatem:

*Funkcja własna operatora Schrödingera z potencjałem periodycznym o okresie  $a$  ma postać:*

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x), \quad (138)$$

gdzie  $u(x)$  jest funkcją okresową o okresie  $a$ .

Sytuacja ta ma także miejsce dla *dowolnych* sieci okresowych, w dowolnym wymiarze, i znana jest jako *twierdzenie Blocha*. Przystępne tego przedstawienie można znaleźć np. w książce [11].

Zapiszmy też:

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)}u(x+a) = e^{ik(x+a)}u(x) = e^{ika}e^{ikx}u(x) = e^{ika}\psi(x); \quad (139)$$

ta własność funkcji własnych przyda się nam za chwilę.

## 7.2 Dopuszczalne energie cząstki w ogólnym potencjale periodycznym

Klasa potencjałów periodycznych, którą się będziemy zajmować, nie będzie najbardziej ogólna; ale będzie dostatecznie reprezentatywnym przypadkiem. Zakładamy, że potencjał jest zerowy na odcinku  $[0, 2b]$ , a następnie niezerowy (i równy jakiejś ograniczonej funkcji  $v(x)$ ) na odcinku  $]2b, 2b+2a]$ . Poza tym jest on periodyczny, tzn.  $V(x+2b+2a) = V(x)$ .

**RYS.**

Popatrzmy na część układu: płaski kawałek (I), następnie 'garb' – potencjał  $v(x)$ , (II) i znów płaski kawałek (plateau) (III). **RYS.** Taki układ to jest dokładnie ten, z którym mieliśmy do czynienia przy rozpraszaniu – konkretnie, rozpraszanie na garbie potencjału. Przypomnijmy sobie też postać funkcji falowej dla takiego układu: w I i III są fale płaskie, w II jakaś funkcja. I jeszcze: przypomnijmy sobie definicję macierzy  $M$  XXXX.

Teraz: Ogólna postać macierzy  $M$  dla przechodzenia cząstki przez barierę potencjału (? Odn. do wzoru?) była

$$M = \begin{bmatrix} e^{i\alpha} \cosh \beta & ie^{i\gamma} \sinh \beta \\ -ie^{i\gamma} \sinh \beta & e^{-i\alpha} \cosh \beta \end{bmatrix} \quad (140)$$

dla dowolnego, *niesymetrycznego* potencjału. Dla potencjału symetrycznego, w powyższym wzorze trzeba wziąć  $\gamma = 0$ . Tu współczynniki  $\alpha, \beta, \gamma$  zależą od postaci potencjału oraz od energii.

Wyberzmy jakieś plateau i oznaczmy je jakimś indeksem, np. 0. Funkcja falowa tamże to:

$$\psi(x) = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx}.$$

W  $n$ -tym plateau będziemy mieć, dzięki temu, że potencjał jest *periodyczny*: (przypomnijmy sobie pokazaną dopiero co własność (139):

$$\psi(x) = A_n e^{ik(x-nL)} + B_n e^{-ik(x-nL)}.$$

Korzystając z definicji macierzy  $M$ , można powiązać współczynniki  $A_n, B_n$  oraz  $A_{n+1}, B_{n+1}$  w dwóch sąsiednich plateau's:

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} A_{n+1} e^{-ikl} \\ B_{n+1} e^{ikl} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} e^{-ikl} & 0 \\ 0 & e^{ikl} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix}; \quad (141)$$

wygodniej będzie napisać tę równość w odwrotną stronę:

$$\begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ikl} & 0 \\ 0 & e^{-ikl} \end{bmatrix} M^{-1} \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix}$$

występujący tu po prawej stronie iloczyn macierzy oznaczmy jako  $\tilde{M}$ :

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} e^{ikl} & 0 \\ 0 & e^{-ikl} \end{bmatrix} M^{-1}. \quad (142)$$

Mamy więc

$$\begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix} = \tilde{M} \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix}$$

i, iterując,

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = \tilde{M}^n \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}.$$

Jawną postać macierzy  $\tilde{M}$  otrzymamy z (140) i (142). Nie ma w tym wyliczeniu nic poza odwróceniem i pomnożeniem macierzy  $2 \times 2$ . Wynik jest:

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} e^{-i\alpha} \cosh \beta e^{ikL} & -ie^{i\gamma} \sinh \beta e^{ikL} \\ ie^{i\gamma} \sinh \beta e^{-ikL} & e^{i\alpha} \cosh \beta e^{-ikL} \end{bmatrix} \quad (143)$$

Bezpośrednim rachunkiem sprawdzamy, że

$$\det \tilde{M} = 1, \quad \text{Tr } \tilde{M} = 2 \cosh \beta \cos(\alpha - kL) \in \mathbb{R};$$

przyda się nam to zaraz.

Musimy więc umieć obliczać dowolne potęgi macierzy, co było (a przynajmniej powinno być) na algebrze. Nie będziemy tu potrzebowali pełnego obliczania  $\tilde{M}^n$ , a jedynie częściowe informacje.

Kluczem do obliczania funkcji od macierzy jest znajomość wartości własnych. Wykonajmy to w ogólnej postaci dla macierzy  $2 \times 2$ .

Gdy mamy wartości własne  $\lambda_1, \lambda_2$ , oraz stowarzyszone z nimi wektory własne  $v_1, v_2$ , to można obliczyć działanie  $\tilde{M}^n$  na dowolny wektor  $v$ . Rozłóżmy go na wektory własne:  $v = v_1 + v_2$  i mamy:

$$\tilde{M}^n v = \lambda_1^n v_1 + \lambda_2^n v_2.$$

Weźmy ogólną macierz  $A$ :

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

Stąd mamy równanie charakterystyczne:

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda \text{Id}) &= \begin{vmatrix} (a - \lambda) & b \\ c & (d - \lambda) \end{vmatrix} = (a - \lambda)(d - \lambda) - bc = ad - bc - \lambda(a + d) + \lambda^2 \\ &= \lambda^2 - (\text{Tr } A)\lambda + \det A; \end{aligned}$$

Konkretyzując dla macierzy  $\tilde{M}$ , mamy

$$\det(\tilde{M} - \lambda \text{Id}) = \lambda^2 - (\text{Tr } \tilde{M})\lambda + 1.$$

Stąd:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left( \text{Tr } \tilde{M} \pm \sqrt{(\text{Tr } \tilde{M})^2 - 4} \right). \quad (144)$$

Widzimy, że oba pierwiastki będą *rzeczywiste*, gdy będzie zachodzić  $(\text{Tr } \tilde{M})^2 - 4 \geq 0$ , tzn. gdy  $|\text{Tr } \tilde{M}| \geq 2$ . Wtedy też jeden z pierwiastków jest większy od 1. Ale to znaczy, że któryś ze współczynników  $A_n, B_n$  (lub oba) rosną wykładniczo z  $n$ , i to samo dotyczy też funkcji falowej. Jest to zatem fizycznie nieakceptowalna sytuacja.

Zatem warunek konieczny, aby dana wartość energii była dopuszczalna, to

$$|\text{Tr } \tilde{M}| \leq 2.$$

Zapiszmy wtedy wartości własne w postaci:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left( \text{Tr } \tilde{M} \pm i\sqrt{4 - (\text{Tr } \tilde{M})^2} \right). \quad (145)$$

Oznaczmy:

$$\cos \delta = \frac{1}{2} \text{Tr } \tilde{M};$$

$\delta$  jest parametrem *rzeczywistym*. Wówczas wartości własne są

$$\lambda_{1,2} = \cos \delta \pm i \sin \delta = e^{\pm i\delta}.$$

Warunek na to, aby dana wartość energii była dopuszczalna, tzn.  $|\text{Tr } \tilde{M}| \leq 2$ , przyjmuje więc postać

$$|\cos \delta| = \frac{1}{2} |\text{Tr } \tilde{M}| = |\cosh \beta \cos(\alpha - kL)| \leq 1 \quad (146)$$

Zaakcentujmy, że wszystko, co mamy powyżej, jest funkcją jedynie od energii (i oczywiście od kształtu potencjału). Oznaczmy:

$$f(E) \equiv \cosh \beta \cos(\alpha - kL)$$

co przepiszmy w postaci

$$-1 \leq f(E) \leq 1 \quad (147)$$

Graniczne (tzn. oddzielające dopuszczalne od niedopuszczalnych) wartości energii będą dla takich  $\alpha, \beta$ , że

$$\cosh \beta \cos(\alpha - kL) = \pm 1. \quad (148)$$

### 7.3 Periodyczny potencjał garbów prostokątnych

Sformułowane w powyższej Subsection warunki są ogólnymi warunkami na dopuszczalne wartości energii w potencjałach periodycznych, składających się z 'garbów' poprzedzielanych kawałkami płaskimi. Zajmiemy się teraz bardziej szczegółowo potencjałem składającym się z samych 'garbów' prostokątnych, o wysokości  $U$  i szerokości  $2a$ , poprzedzielanych odcinkami  $2b$ , tzn. mający postać **RYS.**:

$$V(x) = \begin{cases} U & \text{dla } 0 \leq x \leq a, \\ 0 & \text{dla } a < x < 2b + a, \\ U & \text{dla } 2b + a \leq x \leq 2b + 2a. \end{cases} \quad (149)$$

(potencjał jest *periodyczny* o okresie  $2a + 2b$ ). Jest to tzw. *potencjał Kroniga-Penneya*.

Jak i uprzednio, mamy tutaj  $2a + 2b = L$ .

#### 7.3.1 Przypadek $E < U$

Dla przypadku  $E < U$  macierz  $M$  policzyliśmy już przy okazji rozpraszania – jest to wz. (121). Wyliczenie dla tego przypadku macierzy  $\tilde{M}$  jest już rzeczą czysto techniczną, i przypominając sobie (wz. (140) i (142)) definicję  $\tilde{M}$ , mamy:

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} (\cosh 2\kappa a + i\mathcal{K}_+ \sinh 2\kappa a)e^{-2ika}e^{ikL} & \dots \\ \dots & (\cosh 2\kappa a - i\mathcal{K}_+ \sinh 2\kappa a)e^{2ika}e^{-ikL} \end{bmatrix} \quad (150)$$

(wyrazy pozadiagonalne pominęliśmy jako nieistotne dla śladu), skąd

$$\begin{aligned} f(E) &= \frac{1}{2} \text{Tr } \tilde{M} = \cosh 2\kappa a \cos(-2kb) - \mathcal{K}_+ \sinh 2\kappa a \sin 2bk \\ &= \cosh 2\kappa a \cos(-2kb) + \frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \sinh 2\kappa a \sin 2bk, \end{aligned}$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, iż (p. wz. (127))  $\mathcal{K}_+ = \frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa}$  dla  $E > U$ .

Wykresy  $f(E)$ , wraz z zaznaczonymi dozwolonymi i zabronionymi wartościami energii (*pasmami energetycznymi*), przedstawiono na **RYS. RYS.**.

#### 7.3.2 (Prawie) powtórka z rozrywki: przypadek $E > U$

Powyższe rozważania powtórzmy dla przypadku  $E > U$ ; zmiany są niewielkie, w powyższych wzorach trzeba zmienić w odpowiednich miejscach funkcje hiperboliczne na trygonometryczne. I tak, korzystając z (122),

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} (\cos 2k'a + iK_+ \sin 2k'a)e^{-2ika}e^{ikL} & \dots \\ \dots & (\cos 2k'a - iK_+ \sin 2k'a)e^{2ika}e^{-ikL} \end{bmatrix} \quad (151)$$

skąd

$$\begin{aligned} f(E) &= \frac{1}{2} \text{Tr } \tilde{M} = \cos 2k'a \cos(-2kb) - K_+ \sin 2k'a \sin 2bk \\ &= \cos 2k'a \cos(-2kb) - \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin 2k'a \sin 2bk \end{aligned}$$

pamiętając, że  $K_+$  jest dany wzorem (123).

Wykresy  $f(E)$ , wraz z zaznaczonymi dozwolonymi i zabronionymi wartościami energii (*pasmami energetycznymi*), przedstawiono na **RYS. RYS.**.

#### 7.4 Informacja dopełniająca: Tworzenie się pasm dla skończonych układów – podejście numeryczne

## 8 Modele sieciowe cząstek nieoddziaływujących

Do tej chwili wykładu, rozpatrywaliśmy problemy *jednocząstkowe*, polegające na rozwiązywaniu równania Schrödingera (w jednym lub trzech wymiarach). W trzech wymiarach jednak analizowaliśmy tylko problemy z *symetrią*, dające się dzięki symetrii sferycznej doprowadzić do jednowymiarowych.

Równanie jednowymiarowe jesteśmy w stanie potraktować z numeryczną dokładnością za pomocą jednej z wielu metod (najbardziej uniwersalna jest metoda RK + metoda strzelania). W dwu i trzech wymiarach rozwiązać równanie różniczkowe na wartości własne jest już znacznie trudniej. Jedyna, w miarę uniwersalna metoda, to przekształcenie równania różniczkowego w jakiejś bazie funkcyjnej (w przestrzeni  $L^2(\mathbb{R}^d)$ ) w równanie macierzowe (nieskończeniowymiarowe), a następnie wzięcie najistotniejszej części bazy, otrzymując w ten sposób problem dla macierzy skończeniowymiarowych.

Podobna sytuacja dotyczy też podejść analitycznych – bez symetrii zbiór wyników 'exact' jest znacznie mniejszy, niż dla układów jednowymiarowych.

Poniżej będziemy się zajmowali takimi właśnie problemami macierzowymi (od prostszych do bardziej skomplikowanych).

### 8.1 Struktura funkcji falowej układu fermionów

Reguły antykomutacyjne fermionów:

$$\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} \equiv c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0 = \{c_i, c_j\}$$

$$\{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij}$$

Funkcja falowa układu cząstek nieoddziaływujących jest *antysymetryzowanym iloczynem* funkcji jednoelektronowych.

Dokładniej, jak wygląda przejście od układu cząstek do problemów jednocząstkowych, powiemy dalej, przy omawianiu modeli cząstek oddziaływujących. Tu tylko nadmienimy, że dla cząstek nieoddziaływujących praktycznie wszystko sprowadza się do problemu jednocząstkowego. Dla cząstek oddziaływujących już tak nie jest – problem jednocząstkowy to tylko wstęp do analizy wielocząstkowych (gdzie nasza wiedza, na tle zbioru interesujących problemów, jest uboga).

### 8.2 Od ciągłego do dyskretnego – przybliżenie ciasnego wiązania

Zagadnienie to zostało tu umieszczone nieco zbyt pochopnie: Właściwsze miejsce na dyskusję będzie w części, poświęconej modelom cząstek *oddziaływujących*, tzn. przy modelu Hubbarda.

## 9 Układy jednowymiarowe

### 9.1 Ogólna sytuacja – podejście intuicyjne

Jesteśmy więc w tym momencie na poziomie intuicyjnym. Mamy sieć dyskretną i cząstkę swobodną, skaczącą po węzłach tej sieci. Między węzłami **i** oraz **j** tej sieci cząstka skacze



z amplitudą  $t_{ij}$ . Skok opisujemy jako: 'cząstka znika na  $i$ -tym węźle i pojawia się na  $j$ -tym'. Opisujemy to Hamem:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (152)$$

## 9.2 Układy z periodycznymi warunkami brzegowymi

Mamy zatem cząstkę swobodną, bezspinową (mimo że fermion – co jest bez wątpienia sztuczne, ale jako model, na którym się nabywa doświadczenia, wystarczy), mogącą obsadzać węzły sieci jednowymiarowej. Hamiltonian modelu jest:

$$H = \sum_{ij} t_{ij} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (153)$$

gdzie  $c_i^\dagger, c_i$  są fermionowymi operatorami kreacji/anihilacji cząstki na węźle  $i$ .

O strukturze funkcji falowej mówiliśmy już wcześniej – dla  $M$  cząstek, jest to antysymetryzowany iloczyn funkcji jednoelektronowych. Tu będziemy otrzymywać z Hama (153) funkcje jednoelektronowe

(Rekapitulacja interpretacyjna): Hama (153) można interpretować jako operator energii kinetycznej cząstki, mogącej przeskakiwać z węzła  $i$  na węzeł  $j$  z amplitudą  $t_{ij}$ . Dodatkowo, jeśli  $i = j$ , to ten człon interpretujemy jako potencjał zewnętrzny dla cząstki na węźle  $i$ .

Hama (153) można przedstawić macierzą rozmiaru  $N \times N$ , gdzie  $N$  – długość łańcucha. Widmo jednocząstkowe otrzymamy przez diagonalizację hamiltonianu.

Na tym poziomie ogólności, nie posuniemy się specjalnie naprzód – ogólnej postaci wartości i funkcji własnych dowolnej macierzy symetrycznej nie umiemy napisać. Musimy więc rozważać jakieś podklasy macierzy symetrycznych.

Okazuje się, że łatwo zdiagonalizować macierze, które odpowiadają układom *translacyjnie niezmienniczym, z periodycznymi warunkami brzegowymi*. W przełożeniu na język macierzy znaczy to, że macierze są *cykliczne*. Nieco inaczej mówiąc: Pierwszy warunek (translacyjna niezmienniczość) oznacza, że wartość współczynnika  $t_{ij}$  zależy tylko od różnicy  $|i - j|$ . Druga zaś – że  $t_{|i-j|}$  są takie same dla *wszystkich* węzłów, od 1 do  $N$ .

Okazuje się, że takie macierze łatwo zdiagonalizować przez *dyskretną transformację Fouriera*. Konkretnie, mamy następujący Ansatz (tzn. zgadniętą postać rozwiązania) na wektory własne: Otóż  $k$ -ty wektor własny  $v_k$  ma składowe, będące kolejnymi (od 0 do  $N - 1$ ) potęgami  $k$ -tego pierwiastka z jedynki:

$$v_k = \begin{bmatrix} 1 \\ \epsilon_k^1 \\ \epsilon_k^2 \\ \vdots \\ \epsilon_k^{N-1} \end{bmatrix}; \quad (154)$$

powyżej:

$$\epsilon_k = \exp\left(\frac{2\pi i k}{N}\right),$$

gdzie – jak pamiętamy z algebry –  $k = 0, 1, \dots, N - 1$ .

No to wypróbujmy teraz, 'jak to działa' (podobnie jak maść na szczury). Macierz Hama jest:

$$H = \begin{bmatrix} t_0 & t_1 & t_2 & \dots & t_{n-2} & t_{n-1} \\ t_{n-1} & t_0 & t_1 & \dots & t_{n-3} & t_{n-2} \\ t_{n-2} & t_{n-1} & t_0 & \dots & t_{n-4} & t_{n-3} \\ & & & \dots & & \\ t_1 & t_2 & t_3 & \dots & t_{n-1} & t_0 \end{bmatrix}; \quad (155)$$

tak naprawdę nasza macierz jest *symetryczna*, tzn. mamy  $t_j = t_{N-j}$ ; ale na razie rozważmy ogólny przypadek macierzy niekoniecznie symetrycznej. Zadziałajmy teraz macierzą Hama na wektor (154):

$$Hv_k = \begin{bmatrix} t_0 & t_1 & t_2 & \dots & t_{n-2} & t_{n-1} \\ t_{n-1} & t_0 & t_1 & \dots & t_{n-3} & t_{n-2} \\ t_{n-2} & t_{n-1} & t_0 & \dots & t_{n-4} & t_{n-3} \\ & & & \dots & & \\ t_1 & t_2 & t_3 & \dots & t_{n-1} & t_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \epsilon_k^1 \\ \epsilon_k^2 \\ \vdots \\ \epsilon_k^{N-1} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \cdot t_0 + \epsilon_k^1 t_1 + \epsilon_k^2 t_2 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-2} + \epsilon_k^{N-1} t_{N-1} \\ 1 \cdot t_{n-1} + \epsilon_k^1 t_0 + \epsilon_k^2 t_1 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{n-3} + \epsilon_k^{N-1} t_{n-2} \\ 1 \cdot t_{n-2} + \epsilon_k^1 t_{n-1} + \epsilon_k^2 t_0 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{n-4} + \epsilon_k^{N-1} t_{n-3} \\ \dots \\ 1 \cdot t_1 + \epsilon_k^1 t_2 + \epsilon_k^2 t_3 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-1} + \epsilon_k^{N-1} t_0 \end{bmatrix} = \dots$$

... w  $j$ -tym wierszu wydzielamy przed nawias  $\epsilon_k^j$ ...

$$= \begin{bmatrix} 1(1 \cdot t_0 + \epsilon_k^1 t_1 + \epsilon_k^2 t_2 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-2} + \epsilon_k^{N-1} t_{N-1}) \\ \epsilon_k^1(1 \cdot t_0 + \epsilon_k^1 t_1 + \epsilon_k^2 t_2 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-2} + \epsilon_k^{N-1} t_{N-1}) \\ \epsilon_k^2(1 \cdot t_0 + \epsilon_k^1 t_1 + \epsilon_k^2 t_2 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-2} + \epsilon_k^{N-1} t_{N-1}) \\ \dots \\ \epsilon_k^{N-1}(1 \cdot t_0 + \epsilon_k^1 t_1 + \epsilon_k^2 t_2 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-2} + \epsilon_k^{N-1} t_{N-1}) \end{bmatrix}$$

$$= (1 \cdot t_0 + \epsilon_k^1 t_1 + \epsilon_k^2 t_2 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-2} + \epsilon_k^{N-1} t_{N-1}) \begin{bmatrix} 1 \\ \epsilon_k^1 \\ \epsilon_k^2 \\ \vdots \\ \epsilon_k^{N-1} \end{bmatrix};$$

widać w ten sposób, że  $v_k$  dany przez (154) jest wektorem własnym macierzy (155), o wartości własnej

$$\lambda_k = (1 \cdot t_0 + \epsilon_k^1 t_1 + \epsilon_k^2 t_2 + \dots + \epsilon_k^{N-2} t_{N-2} + \epsilon_k^{N-1} t_{N-1}). \quad (156)$$

Pozostaje jedynie upewnić się, czy wektory postaci (154) to *wszystkie* wektory własne, tzn. że wszystkie one są liniowo niezależne. Zrobimy to odwołując się do faktu, że jeśli mamy  $N$  wektorów liniowo niezależnych, każdy o  $N$  składowych, to zbudowana z nich macierz ma niezerowy wyznacznik. Jeśli z wektorów  $v_k$ ,  $k = 1, \dots, N$  postaci (154) zbudujemy wyznacznik, to otrzymamy

$$V_N = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ \epsilon_1 & \epsilon_2 & \dots & \epsilon_{N-1} & \epsilon_N \\ \epsilon_1^2 & \epsilon_2^2 & \dots & \epsilon_{N-1}^2 & \epsilon_N^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \epsilon_1^{N-1} & \epsilon_2^{N-1} & \dots & \epsilon_{N-1}^{N-1} & \epsilon_N^{N-1} \end{vmatrix} \quad (157)$$

który jest *niezerowy*, bo – jeśli kto pamięta, to dobrze, a jeśli nie pamięta, to niech zagładnie do jakiej książki z algebry – jest on równy

$$V_N = \prod_{0 \leq j < k}^N (\epsilon_j - \epsilon_k)$$

i – dla postawienia kropki nad 'i' – kojarząc, że wszystkie pierwiastki są rozłożone na wierzchołkach  $N$ -kąta foremego, więc żaden z czynników nie może być równy zeru.

### 9.3 Przeskok między najbliższymi sąsiadami

No to teraz wypróbujmy powyższe wzorki w sytuacji, gdy mamy przeskoki tylko między najbliższymi sąsiadami:

$$H_{mn} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (158)$$

gdzie symbol  $\langle i, j \rangle$  oznacza, że sumujemy tylko między najbliższymi sąsiadami.

Macierz Hama jest tu:

$$H_{mn} = -t \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (159)$$

Z wzoru (156) mamy od razu, na  $k$ -tą energię własną  $E_k$ ,

$$E_k = -t(\epsilon_k + \epsilon_k^{-1}) = -2t \cos \frac{2\pi k}{N}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (160)$$

Wykresy tej 'dyspersji' (tak się czasem nazywa zależność  $E(k)$ ) przedstawiono na **RYS.**, a w wersji uciągłonej (funkcja *cos* może mieć dowolny argument ciągły, nie musi on być dyskretny) na **RYS.** Gdy rozpatrujemy duże układy, to wygodniej jest używać takiej właśnie 'uciągłonej' zmiennej; nazwijmy tu ją

$$\kappa = \frac{2k\pi}{N}.$$

Zakres zmienności zmiennej  $\kappa$  to  $[0, 2\pi[$  lub – równoważnie, a czasem wygodniej – wziąć  $k \in [-\pi, \pi[$ .

Zbiór wartości wielkości  $k$  jest ważną wielkością w fizyce ciała stałego, a nazywa się on *pierwszą strefą Brillouina*. Pojęcie to przenosi się na wyższe wymiary i inne typy sieci okresowych; niedługo zobaczymy, jak ta strefa wygląda dla sieci kwadratowej i sześciokątnej.

Poczynimy tu jeszcze następującą uwagę:

Asymptotyka  $E(k)$  jest dla małych  $k$  *kwadratowa*. Przypomnijmy sobie, że taka sama była zależność energii od liczby kwantowej dla swobodnej cząstki w nieskończenie wysokiej studni potencjału. Analogicznie, w mechanice klasycznej energia zależy kwadratowo od pędu.

### 9.3.1 Gęstość stanów

Ważną wielkością w fizyce ciała stałego (i nie tylko) jest *gęstość stanów*, tzn. ilość stanów na jednostkę przedziału energii.

Oprócz tego, że jest to naturalna wielkość, to jest też pożyteczna. Przypuśćmy, że obliczamy całkę z jakiejś wielkości  $f(\kappa)$  po pierwszej strefie Brillouina  $\mathcal{B}$ . Załóżmy na początek, że zamiana wielkości  $\kappa, E$  jest wzajemnie jednoznaczna. (Z otrzymanego dopiero co wykresu funkcji  $E(k)$  widzimy, że tak nie jest; ale to jedynie komplikacja techniczna – możemy podzielić przedział  $[-\pi, \pi]$  na dwa przedziały:  $[-\pi, \pi] = [-\pi, 0] \cup [0, \pi]$ , i na każdym z tych dwóch przedziałów zamiana zmiennych jest już wzajemnie jednoznaczna. Poniżej nie będziemy już tego zaznaczać).

Mamy wtedy:

$$f(\kappa) = f(\kappa(E)) \equiv \tilde{f}(E).$$

Wyraźmy teraz całkę w nowej zmiennej. Korzystając z (miejmy nadzieję, że dobrze znanego) wzoru na zamianę zmiennych, mamy:

$$\int_{\mathcal{B}} f(k) dk = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \tilde{f}(E) \frac{d\kappa}{dE} dE,$$

gdzie  $E_{\min}$  i  $E_{\max}$  są najmniejszą i największą wartością energii w przedziale całkowania.

Czynnik, który się tu pojawia (jednowymiarowy jacobian) to właśnie jednowymiarowa *gęstość stanów*:

$$\rho(E) \equiv \frac{d\kappa(E)}{dE}. \quad (161)$$

Policzmy w naszym przypadku gęstość stanów na przedziale  $k \in [0, \pi]$  (na drugim przedziale wzór będzie, z symetrii, identyczny). Mamy:

$$E(\kappa) = -2t \cos \kappa \quad \text{skąd} \quad \kappa = \arccos \left( \frac{-E}{2t} \right), \quad (162)$$

tak więc

$$\rho(E) = \frac{d\kappa(E)}{dE} = \frac{1}{2t} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{E^2}{4t^2}}} = \frac{1}{\sqrt{4t^2 - E^2}} \quad (163)$$

Dla porównania, policzmy gęstość stanów w przypadku dyskretnym, według narzucającego się wzoru na dyskretną pochodną:

$$\rho_k = \frac{k - (k-1)}{E_k - E_{k-1}} = \frac{1}{E_k - E_{k-1}}$$

Wykresy obu tych wielkości przedstawiono na **RYS.** i **RYS.**

Poczynimy tu jeszcze uwagę, że o ile rozpatrujemy tu model cząstek *nieoddziaływujących*, to własności rozpatrywanego przez nas członu kinetycznego (a w konsekwencji również gęstości stanów) są kluczowe przy analizie modeli cząstek *oddziaływujących* – takich jak np. model Hubbarda.

## 9.4 Układy z dalszymi przeskokami

Rozpatrzmy teraz przykład, gdzie cząstka może skakać nie tylko między najbliższymi, ale też między dalszymi sąsiadami. Dokładniej, skoki między węzłami n.n. mają amplitudę

$t$ , zaś między dalszymi sąsiadami (tzn. n.n.n. – next nearest neighbours) – amplitudę  $t'$  **RYS.** Mamy w ten sposób macierz hamiltonianu (z cyklicznymi warunkami brzegowymi):

$$H = -t \begin{bmatrix} 0 & 1 & \alpha & 0 & \dots & 0 & \alpha & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \alpha & \dots & 0 & 0 & \alpha \\ \alpha & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & \\ 1 & \alpha & 0 & 0 & \dots & \alpha & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (164)$$

gdzie  $\alpha = \frac{t'}{t}$ . Z wyrażenia (156) na wartości własne macierzy cyklicznej mamy od razu:

$$E_k = -t[\epsilon_k + \epsilon_k^{-1} + \alpha(\epsilon_k^2 + \epsilon_k^{-2})] = -2t \left[ \cos\left(\frac{2\pi k}{N}\right) + \alpha \cos\left(\frac{4\pi k}{N}\right) \right] \quad (165)$$

Jak i uprzednio, warto wprowadzić uciągloną zmienną  $\kappa = \frac{2\pi k}{N}$ ,  $\kappa \in [-\pi, \pi]$ . Dla  $|\alpha| \leq 0.25$  wykres  $E(k)$  ma *jedno* minimum w strefie Brillouina (w środku) i analizę tego przypadku dalej się zajmujemy, odkładając na później, co znaczy przypadek, gdy są dwa (lub więcej) minimów.

Wykresy  $E(\kappa)$ , w uciąglonej, jak poprzednio, zmiennej, mamy na **RYS.** dla  $\alpha = 0.1$ ,  $0.25$  i  $-0.25$ . Widać, że dla  $|\alpha| < 0.25$  wykres jakościowo jest podobny do tego, z którym mieliśmy do czynienia w przypadku n.n. Natomiast dla  $\alpha = -0.25$  mamy anomálną dyspersję dla małych  $k$ :  $E \sim \kappa^4$  zamiast standardowej  $E \sim \kappa^2$ . Jak zaraz zobaczymy, przekłada się to na anomálną gęstość stanów na brzegu pasma.

Wyznamy więc gęstości stanów. W tym celu najspierw zapiszmy  $E(\kappa)$  daną przez (165) jako

$$E(\kappa) = -2t[\cos \kappa + \alpha \cos 2\kappa] = -2t[\cos \kappa + 2\alpha \cos^2 \kappa - \alpha]$$

(skorzystaliśmy tu z tożsamości  $\cos 2\kappa = \cos^2 \kappa - \sin^2 \kappa = 2\cos^2 \kappa - 1$ ) – dostaliśmy w ten sposób równanie kwadratowe na  $\cos \kappa$ . Rozwiązując je, mamy:

$$\cos \kappa = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 8\alpha\left(\alpha - \frac{E}{2t}\right)}}{4\alpha}.$$

Który pierwiastek jest właściwy? Zbadajmy tu granicę  $\alpha \rightarrow 0$ ; powinien wtedy odtwarzać się wzór (162). Pierwiastek z minusem daje  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} (\cos \kappa)_- = -\infty$  czyli źle; zaś z plusem daje:  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} (\cos \kappa)_+ = -\frac{E}{2t}$ , czyli ok. Mamy więc

$$\cos \kappa = \frac{-1 + \sqrt{1 + 8\alpha\left(\alpha - \frac{E}{2t}\right)}}{4\alpha} \implies \kappa = \arccos \left[ \frac{-1 + \sqrt{1 + 8\alpha\left(\alpha - \frac{E}{2t}\right)}}{4\alpha} \right]$$

skąd po zróżniczkowaniu dostajemy gęstość stanów

$$\rho(E) := \frac{2}{t \sqrt{1 + 8\alpha\left(\alpha - \frac{E}{2t}\right)}} \cdot \frac{1}{\sqrt{16 - \left(-1 + \sqrt{1 + 8\alpha\left(\alpha - \frac{E}{2t}\right)}\right)^2} \alpha^{-2}}$$

Dla  $|\alpha| < 0.25$  wykresy  $\rho(E)$  są podobne jak w przypadku, gdy  $\alpha = 0$ . Pewne znaczenie ma tu asymptotyka gęstości, gdy  $E$  zbliża się do brzegu pasma;  $\rho(E)$  rozbiega się wtedy jak:

$$\rho(E) \sim |E - E_b|^{-\frac{1}{2}}; \quad (166)$$

Gdy natomiast  $\alpha = -0.25$  (+0.25), zależność  $E(\kappa)$  ma minimum (maksimum) zdegenerowane (kwartyczne). Pociąga to za sobą inną, niż standardowa, asymptotykę: Z lewego (prawego) brzegu pasma mamy

$$\rho(E) \sim |E - E_b|^{-\frac{3}{4}}. \quad (167)$$

(ĆW.)

Duża gęstość stanów jest czynnikiem sprzyjającym ferromagnetyzmowi w układach cząstek oddziaływujących – powiemy o tym (jeśli dojdziemy) w Section poświęconej modelowi Hubbarda.

## 9.5 Zwiększenie komórki elementarnej. Tworzenie pasm

Zajmiemy się teraz przypadkami, gdy mamy cząstkę w *potencjale* na sieci. O potencjale tym zakładamy, że jest *okresowy*; ale, żeby problem był nietrywialny, to okres musi być większy niż stała sieci, więc równy przynajmniej 2.

Najpierw jednak: Jak uwzględniamy obecność potencjału. Otóż zauważmy, że operator  $c_i^\dagger c_i$  opisuje przeskok cząstki z węzła  $i$  na *ten sam* węzeł, a zatem możemy go interpretować jako *operator liczby cząstek* na węźle (0 lub 1 w przypadku fermionowym). Obecność potencjału opisujemy w sposób: Jeśli cząstka znajduje się na  $i$ -tym węźle, to ma energię  $U$ . Zatem 'potencjalną' część hamiltonianu opiszemy jako

$$H_{\text{pot}} = \sum_i U_i c_i^\dagger c_i$$

(potencjał  $U_i$  na węźle  $i$ ). Często piszemy go jako:

$$H_{\text{pot}} = \sum_i U_i n_i,$$

gdzie operator

$$n_i = c_i^\dagger c_i$$

jest wspomnianym wyżej *operatorem liczby cząstek* na węźle  $i$ .

## 9.6 Potencjał o okresie 2

Rozpatrzmy teraz jednowymiarową sieć z *potencjałem periodycznym* o okresie 2. Mamy więc łańcuch o długości  $N = 2l$  węzłów. Na nieparzystych węzłach potencjał przyjmuje wartość 0, a na parzystych  $U$ . Taki potencjał nazwiemy *potencjałem Néela* przez analogię z uporządkowaniem antyferromagnetycznym, które tak się właśnie często nazywa. Nakładamy periodyczne warunki brzegowe. Co do przeskoków, zakładamy, że mogą one następować między najbliższymi sąsiadami. Hamiltonian będzie więc dany następującą macierzą:

$$H_{\text{Neel}} = \begin{bmatrix} 0 & -t & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -t \\ -t & U & -t & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & U & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -t & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -t & U \end{bmatrix} \quad (168)$$

Musimy policzyć wektory i wartości własne tej macierzy. Nie jest to już macierz cykliczna, dlatego też nie możemy oczekiwać, że Ansatz (czyli podstawienie) postaci (154) tu zadziała.

Ale! Okazuje się, że zadziała inny nieco Ansatz. Postulujemy mianowicie, że  $k$ -ty wektor własny  $v_k$  ma postać:

$$v_k = \begin{bmatrix} 1 \\ x\epsilon_k \\ \epsilon_k^2 \\ x\epsilon_k^3 \\ \vdots \\ \epsilon_k^{N-2} \\ x\epsilon_k^{N-1} \end{bmatrix} \quad (169)$$

Jak możemy taki Ansatz umotywić? (*Nie musimy* co prawda motywować, bo możemy przyjąć postawę: 'Skoro jest i działa, to nad czym się tu jeszcze zastanawiać'. Ale nie przyjmujemy tu takiej wąsko utylitarystycznej postawy i jednak zastanowimy się nad pochodzeniem tego Ansatzu).

Otóż zauważmy, że w przypadku potencjału Néela mamy dalej do czynienia ze strukturą *periodyczną*, co prawda nie o okresie 1 (jak uprzednio), ale o okresie 2. Wybierając jako element struktury ('komórkę elementarną') nie pojedynczy węzeł, ale dwa sąsiednie węzły, musimy do tego dopasować też strukturę postulowanego wektora własnego. Zgadujemy więc, że w wektorze własnym będziemy mieć kolejne potęgi pierwiastków z jedynki ale w odniesieniu do sąsiednich *dwóch* składowych. Struktura wektora własnego (169) jest realizacją tego rozumowania. Czy dobrze zgadliśmy – trzeba policzyć...

Równanie na wartości własne będzie miało postać:

$$\begin{bmatrix} 0 & -t & 0 & 0 & \dots & 0 & -t \\ -t & U & -t & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & U & \dots & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & \dots & -t & U \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ x\epsilon_k \\ \epsilon_k^2 \\ x\epsilon_k^3 \\ \vdots \\ \epsilon_k^{N-2} \\ x\epsilon_k^{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -tx(\epsilon_k + \epsilon_k^{N-1}) \\ -t - xU\epsilon_k - t\epsilon_k^2 \\ -tx(\epsilon_k + \epsilon_k^3) \\ -t\epsilon_k^2 - xU\epsilon_k^3 - t\epsilon_k^4 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = E_k \begin{bmatrix} 1 \\ x\epsilon_k \\ \epsilon_k^2 \\ x\epsilon_k^3 \\ \vdots \\ \epsilon_k^{N-2} \\ x\epsilon_k^{N-1} \end{bmatrix}$$

Aby równanie na wartości własne było spełnione, parametr  $x$  musi spełniać równania (dla składowych: nieparzystej i parzystej):

$$\begin{cases} -tx(\epsilon_k + \epsilon_k^{-1}) = E_k \\ -t\epsilon_k^{-1} - xU - t\epsilon_k = E_k x \end{cases}$$

Mamy więc tu układ dwu równań na dwie niewiadome ( $x$  oraz  $E_k$ ). Możemy z tego układu prosto wyeliminować  $x$  i otrzymać samo równanie na  $E_k$ . Po nieskomplikowanych rachunkach (wyciągnięcie  $x$  z pierwszego równania i wstawienie do drugiego) dostajemy równanie na  $E_k$ :

$$E_k^2 + UE_k - 4t^2 \cos^2 \kappa = 0 \quad (170)$$

gdzie, jak i uprzednio,  $\kappa = \frac{2\pi k}{N}$ . Równanie to ma dwa pierwiastki:

$$E_1 = \frac{-U - \sqrt{U^2 + 16t^2 \cos^2 \kappa}}{2}, \quad E_2 = \frac{-U + \sqrt{U^2 + 16t^2 \cos^2 \kappa}}{2} \quad (171)$$

Mamy tu dwie funkcje; którą z nich wybrać? Aby to zbadać, weźmy przypadek graniczny  $U = 0$ . Mamy wtedy:  $E_1 = -2t|\cos \kappa|$ ,  $E_2 = +2t|\cos \kappa|$ . Porównując to z dyspersją

znalezioną 2 Subsections wcześniej (przypadek n.n.) widać, że musimy wziąć  $E_1$  w zakresie  $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$  oraz  $E_2$  w pozostałym zakresie.

Taki więc wybór rozwiązań:  $E_1$  dla  $\kappa \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$  oraz  $E_2$  w pozostałym zakresie, musimy wziąć dla dowolnego  $U$ . Jako wynik, otrzymujemy *przerwę energetyczną* – nieciągłość  $E(\kappa)$  pojawiającą się dla  $\kappa = \pm\frac{\pi}{2}$ . Zilustrowano to na wykresie **RYS**.

Mamy tu więc dwa pasma, przedzielone przerwą energetyczną.

Zajmijmy się teraz DOS'ami. W tym celu równanie (??) przepiszmy nieco inaczej, a mianowicie:

$$E^2 + UE - 2t^2 - 2t^2 \cos 2\kappa = 0 \quad (172)$$

skąd mamy

$$\kappa = \frac{1}{2} \arccos \left( \frac{1}{2t^2} (E^2 + UE - 2t^2) \right),$$

oraz

$$\rho(E) = \frac{d\kappa}{dE} = \frac{|2E + U|}{2\sqrt{4t^4 - (E^2 + UE - 2t^2)^2}} \quad (173)$$

Wykres jest na **RYS**.

## 9.7 Układ z dwoma stałymi przeskoku

Tworzenie pasm może też być wywołane innymi czynnikami, niż potencjał. Zobaczymy tu prosty przykład, jak do powstawania pasm prowadzi obecność dwóch różnych naprzemiennie występujących *stałych przeskoku*.

Rozpatrzmy zatem model o parzystej ilości węzłów:  $N = 2m$ , okresowych warunkach brzegowych, i stałych przeskoku między najbliższymi sąsiadami, zdefiniowanych następująco:

$$t_{2i+1,2i+2} = t_1 \quad (i = 0, 1, \dots, m-1), \quad t_{2i,2i+1} = t_2 \quad (i = 1, \dots, m \text{ mod } N). \quad (174)$$

Macierz Hama jest odpowiednią modyfikacją macierzy (159):

$$H_{t_1 t_2} = \begin{bmatrix} 0 & -t_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -t_2 \\ -t_1 & 0 & -t_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_2 & 0 & -t_1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -t_2 & 0 & -t_1 \\ -t_2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -t_1 & 0 \end{bmatrix} \quad (175)$$

Ansatz na wektor własny weźmiemy w postaci analogicznej jak (169), ale różniącej się w jednym szczególe – postać poniżej dogodniejsza jest do późniejszych rozszerzeń:

$$v_k = \begin{bmatrix} x_1 \epsilon_k \\ x_2 \epsilon_k^2 \\ x_1 \epsilon_k^3 \\ x_2 \epsilon_k^4 \\ \vdots \\ x_1 \epsilon_k^{N-1} \\ x_2 \epsilon_k^N \end{bmatrix} \quad (176)$$

W ten sposób możemy uwalniać się od wyjątków, gdzie wszystkie nieparzyste składowe wektora własnego zerowałyby się; trzeba by było wtedy modyfikować Ansatz w poprzedniej postaci (169). Ponadto powyższy Ansatz (176) jest wygodniejszy.



Działając Hamem (175) na wektor (176), otrzymamy następujące równania na składowe: parzystą i nieparzystą:

$$(Hv_k)^j = \begin{cases} -t_2x_2e^{ik(j-1)} - t_1x_2e^{ik(j+1)} = E_kx_1e^{ikj} & \text{dla } j \text{ nieparzystych,} \\ -t_1x_1e^{ik(j-1)} - t_2x_1e^{ik(j+1)} = E_kx_2e^{ikj} & \text{dla } j \text{ parzystych,} \end{cases} \quad (177)$$

co daje równania na wielkości  $E, x_1, x_2$ :

$$\begin{bmatrix} E_k & t_1e^{ik} + t_2e^{-ik} \\ t_1e^{-ik} + t_2e^{ik} & E_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 0. \quad (178)$$

Aby powyższy układ równań miał nietrywialne rozwiązanie, musi zniknąć jego wyznacznik, co daje równanie na  $E_k$ :

$$E_k^2 + 2t_1t_2 \cos 2k E_k + t_1^2 + t_2^2 = 0, \quad (179)$$

które ma rozwiązania

$$E_k = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2} \sqrt{1 + \frac{2t_1t_2}{t_1^2 + t_2^2} \cos 2k}. \quad (180)$$

Tych rozwiązań jest dwa razy za dużo –  $E$  jest niejednoznaczna funkcją  $k$  **RYS.**, więc przez ciągłość musimy rozstrzygnąć, które gałęzie wziąć, a które odrzucić. Dla  $t_1 = t_2 = t$  mamy:

$$E = \pm \sqrt{2}t \sqrt{1 + \cos 2k} = \pm \sqrt{2}t \sqrt{1 + \cos^2 k - \sin^2 k} = \pm 2t \cos k$$

Widać, że dla  $k \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$  trzeba wziąć gałąź dolną, a odrzucić górną; natomiast w pozostałym zakresie  $k$  trzeba wziąć górną a odrzucić dolną.

Jako wynik znów mamy widmo z przerwą energetyczną. **RYS.** zaś

## 9.8 Potencjały o większych okresach

Rozpatrzmy teraz potencjały o większych okresach i zobaczymy, jak się to odbija na strukturze pasm. Weźmy potencjały następującej postaci:

1. **Okres 3:**  $0, 0, U, 0, 0, U, \dots$
2. **Okres 4:**  $0, 0, 0, U, 0, 0, 0, U, \dots$
3. **Okres 5:** to jest jako zadanie

Nie są to oczywiście najogólniejsze postaci potencjałów. Ale chcemy rozpatrzeć jakieś przykłady, gdzie będzie widać, jak postępować i jak otrzymać interesujące wielkości (struktura pasm, gęstości stanów).

### Potencjał o okresie 3

Omówiony w Subsec. 9.6 Ansatz na wektory własne można zmodyfikować tak, aby ogarniał on również potencjały o większym okresie.

Rozpatrujemy więc potencjał o okresie 3 postaci:  $0, 0, U, 0, 0, U, \dots$ . Zakładamy, że mamy łańcuch o długości  $N = 3l$  z okresowymi warunkami brzegowymi. Zgadnijmy,

że dobrym analogonem Ansatzu (169) będzie wektor z *trzema* parametrami:

$$v_k = \begin{bmatrix} x_1 \epsilon_k \\ x_2 \epsilon_k^2 \\ x_3 \epsilon_k^3 \\ x_1 \epsilon_k^4 \\ \vdots \\ x_2 \epsilon_k^{N-1} \\ x_3 \epsilon_k^N \end{bmatrix} \quad (181)$$

*Uwaga.* Dla Neela mogliśmy wziąć analogiczną postać o 'okresie 2' z *dwoma* parametrami  $x_1, x_2$  zamiast z jednym  $x$ . Wzięliśmy jednak wektor postaci (169) dla większej czytelności. Teraz okaże się, że wygodniej jest wziąć wektor postaci (181); musimy bowiem rozwinąć technologię wyciągania interesujących wielkości z układu równań zawierającego  $x_1, x_2, x_3$  oraz  $E_k$ .

Wypiszmy tu macierz Hama łącznie z działaniem na wektor (181):

$$\begin{bmatrix} 0 & -t & 0 & 0 & \dots & 0 & -t \\ -t & 0 & -t & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -t & U & -t & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & & & & \dots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & \dots & -t & U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \epsilon_k \\ x_2 \epsilon_k^2 \\ x_3 \epsilon_k^3 \\ x_1 \epsilon_k^4 \\ \vdots \\ x_2 \epsilon_k^{N-1} \\ x_3 \epsilon_k^N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -tx_2 \epsilon_k^2 - tx_3 \epsilon_k^N \\ -tx_1 \epsilon_k^1 - tx_3 \epsilon_k^3 \\ -tx_2 \epsilon_k^2 - x_3 U \epsilon_k^3 - tx_1 \epsilon_k^4 \\ -tx_3 \epsilon_k^3 - tx_2 \epsilon_k^5 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = E_k \begin{bmatrix} x_1 \epsilon_k \\ x_2 \epsilon_k^2 \\ x_3 \epsilon_k^3 \\ x_1 \epsilon_k^4 \\ \vdots \\ x_2 \epsilon_k^{N-1} \\ x_3 \epsilon_k^N \end{bmatrix} \quad (182)$$

Widać, że równanie na wartości własne będzie spełnione, gdy  $E_k$  oraz  $x_1, x_2, x_3$  będą spełniały równania:

$$\begin{cases} -tx_2 \epsilon_k^2 - tx_3 \epsilon_k^N = E_k x_1 \epsilon_k \\ -tx_1 \epsilon_k^1 - tx_3 \epsilon_k^3 = E_k x_2 \epsilon_k^2 \\ -tx_2 \epsilon_k^2 - x_3 U \epsilon_k^3 - tx_1 \epsilon_k^4 = E_k x_3 \epsilon_k^3 \end{cases} \quad (183)$$

bo w każdych kolejnych trzech składowych spełniane są *te same* warunki! (dokładniej, dla  $j$ -tej składowej, pomnożone przez  $j$ -tą potęgę  $\epsilon_k$ ).

Reorganizując nieco warunki (183), mamy

$$\begin{cases} E_k x_1 + t \epsilon_k x_2 + t \epsilon_k^{-1} x_3 = 0 \\ t \epsilon_k^{-1} x_1 + E_k x_2 + t \epsilon_k x_3 = 0 \\ t \epsilon_k x_1 + t \epsilon_k^{-1} x_2 + (E_k - U) x_3 = 0 \end{cases} \quad (184)$$

Widać, że w zmiennych  $x_1, x_2, x_3$  jest to układ równań liniowych, układ *jednorodny*, tak więc będzie on miał niezerowe rozwiązanie, gdy wyznacznik tego układu będzie się zerował:

$$\begin{vmatrix} E_k & t \epsilon_k & t \epsilon_k^{-1} \\ t \epsilon_k^{-1} & E_k & t \epsilon_k \\ t \epsilon_k & t \epsilon_k^{-1} & E_k - U \end{vmatrix} \quad (185)$$

Wyznacznik ten można policzyć ręcznie, i otrzymujemy stąd warunek na  $E_k$

$$E_k^3 - E_k^2 U - 3t^2 E_k + t^3 \left( \epsilon_k^3 + \frac{1}{\epsilon_k^3} \right) + t^2 U$$

$$E_k^3 - E_k^2 U - 3t^2 E_k + 2t^3 \cos^3(\kappa) + t^2 U = 0. \quad (186)$$

Dyspersję, czyli zależność  $E(\kappa)$  (zmieniliśmy tu zmianę argumentu z  $k$  na  $\kappa = \frac{2\pi k}{N}$ ), otrzymamy przez rozwiązanie tego równania. Warunkiem istnienia rozwiązań jest, aby wartość cosinusa zawierała się w przedziale  $[-1, 1]$ .

Można to zilustrować, wykreślając  $f(\mathcal{E}) = \mathcal{E}^3 - \mathcal{E}^2 u - 3\mathcal{E} + u$  (tu  $\mathcal{E}$  oraz  $u$  są przeskalowanymi zmiennymi:  $\mathcal{E} = \frac{E}{t}$ ,  $u = \frac{U}{t}$ ) i patrząc, dla jakich argumentów  $\mathcal{E}$  funkcja przyjmuje wartości pomiędzy  $-1$  a  $1$ . Na **RYS.** zrobiono to dla  $U = 0$ , a na **RYS.** dla  $t = U = 1$ . Widać utworzenie się *dwóch* pasm.

Czy ta procedura czegoś Czytelnikowi nie przypomina?

Aby konkretnie znaleźć zależność funkcję  $E(\kappa)$ , trzeba oczywiście rozwiązać równanie (186), (można to zrobić ściśle – kłaniają się tutaj wzory Cardano), co zostawimy tu jako zadanie być może będą rysunki.

Teraz zajmijmy się *gęstością stanów*. Z wzoru (186) wyliczamy:

$$\kappa = \frac{1}{3} \arccos \left( -\frac{E^3}{2t^3} + \frac{E^2 U}{2t^3} + \frac{3E}{2t} - \frac{U}{2t} \right) \quad (187)$$

i stąd

$$\rho(E) = \frac{1}{6t^3} \frac{3E^2 - 2UE - 3t^2}{\sqrt{1 - (-E^3 + UE^2 + 3E - U)^2}} \quad (188)$$

Wykres  $\rho(E)$  przedstawiono na **RYS.**

W analogiczny sposób można otrzymać warunki na dopuszczalne energie oraz dyspersję, a z nich gęstości stanów, dla innych potencjałów. Trzy takie problemy relegujemy do Zadań.

## 9.9 'Sawtooth': przykład przypadku 'płaskodenne' czyli 'flat-band dispersion'

### Motto:

Idzie światem owa z mora, co ma kibić PÍLY  
a zębami chłopców nęci i zna czar mogiły.

Zobaczyła parobczaka na brzegu doliny:  
'Ciebie pragnę, śnie jedyny – dyny moje dyny!

Pocałunki dla cię, chłopcze, w ostrą stal uzbroje,  
Błysk – niedobłyśk na wyblysku – oto ZĘBY moje! [...]

Oczaruj się tym widokiem, coś go nie widywał,  
Ośnijże się tymi snami, coś ich nie wyśniwał! [...]

Będę ciebie kochał mocą, z którą się mocuję,  
Będę ciebie tak całował, jak nikt nie całuje!

Będę gardził dziewczętami, com je miał w swej woli,  
Bo z nich każda od miłości lka, jak od niedoli! [...]

Zazgrzytała od rozkoszy, naostrzyła zęby:  
'Idę w miłość, jak chadzałam na leśne wyręby!'

Zaszumiała nad nimi ta wierzba złotocha –  
Poznał chłopiec, czym w uścisku jest stal, gdy pokocha! [...]

B. Leśmian, *Pita*



Opowieść poniżej nie ma tych napięć uczuciowych co ta powyżej, ale jest – wg autora – również ciekawa.

Jako ostatni tu przykład rozpatrzmy łańcuch jednowymiarowy ze specjalnym doбором potencjałów na węzłach oraz stałych sprzężenia. **RYS.** Można też na niego patrzeć bardziej geometrycznie **RYS.**; skojarzenie jest dość oczywiste i stąd nazwa 'sawtooth'.

Zaprezentujemy ten układ, aby zobaczyć, jakie dziwne (bądź – jeśli ktoś nie dziwi się byle czemu – to powiemy: 'jakie różne od dotąd spotkanych') zjawiska mogą wystąpić w prostych układach, z periodycznymi stałymi przeskoku oraz periodycznymi potencjałami, gdzie okres obydwu jest niewielki.

Układ zależy od dwóch parametrów:  $\nu$  oraz  $U$ .

Uprzedzając wypadki – okazuje się mianowicie, że mamy tu dwa pasma energetyczne. Na ogół są to 'uczciwe' pasma, podobne do tych, jakie mieliśmy dla przypadku Néela. Jednak dla specjalnej relacji między parametrami  $\nu$  oraz  $U$ , jedno z tych pasm jest *całkowicie zdegenerowane*: wszystkie stany z tego pasma (połowa wszystkich stanów) ma tę samą energię. Innymi słowy, szerokość tego pasma wynosi zero.

Wynik ten może byłby tylko ciekawostką, ale okazuje się, że takie układy są ważne, jeśli interesujemy się magnetyzmem w modelu Hubbarda. Dla takich układów można ściśle pokazać (może zdążymy to zrobić), że *ich stan podstawowy jest ferromagnetyczny*. Wzbudzają więc spore zainteresowanie z punktu widzenia magnetyków molekularnych (pod kątem wykorzystania w pamięciach magnetycznych) i doczekały się analizy w ponad dwustu pracach.

Charakteryzujemy go następująco:

1. Pomędzy najbliższymi sąsiadami mamy stałą przeskoku  $\nu$ .
2. Ponadto pomiędzy sąsiadami *nieparzystymi* mamy stałą przeskoku  $\nu^2$ ; pomiędzy sąsiadami parzystymi stała przeskoku wynosi 0.
3. Na węzłach nieparzystych mamy potencjał  $U$ ,
4. zaś na węzłach parzystych potencjał równy 1.

(**RYS.** raz jeszcze).

Nakładamy periodyczne warunki brzegowe, zakładając parzystą ilość węzłów, i mamy macierz Hama następującej postaci:

$$H_{\Delta\Delta} = \begin{bmatrix} U & \nu & \nu^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \nu^2 & \nu \\ \nu & 1 & \nu & 0 & & & & \dots & & & \\ \nu^2 & \nu & U & \nu & \nu^2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu & 1 & \nu & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu^2 & \nu & U & \nu & \nu^2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \quad (189)$$

Próbujemy tu wektora własnego jak dla Néela, bo – z wyglądu macierzy – wnosimy, że mamy periodyczność o okresie 2. Dla przypomnienia przytoczymy postać Ansatzu na wektor własny, aby było lepiej widoczne, co otrzymamy przy mnożeniu macierzy przez wektor:

$$v_k = \begin{bmatrix} x_1 \epsilon_k \\ x_2 \epsilon_k^2 \\ x_1 \epsilon_k^3 \\ x_2 \epsilon_k^4 \\ \vdots \\ x_1 \epsilon_k^{N-1} \\ x_2 \epsilon_k^N \end{bmatrix}$$

Po pomnożeniu macierzy  $H_{\Delta\Delta}$  na wektor, wypiszmy drugą i trzecią składową równości  $H_{\Delta\Delta}v_k = E_kv_k$  (każde dwie pozostałe kolejne są identyczne, jeśli pomnożyć przez odpowiednią potęgę  $\epsilon_k$ ):

$$\begin{aligned} \nu x_1 \epsilon_k + x_2 \epsilon_k^2 + \nu x_1 \epsilon_k^3 &= E_k x_2 \epsilon_k^2 \\ \nu^2 x_1 \epsilon_k + \nu x_2 \epsilon_k^2 + U x_1 \epsilon_k^3 + \nu x_2 \epsilon_k^4 + \nu^2 x_1 \epsilon_k^5 &= E_k x_1 \epsilon_k^3 \end{aligned}$$

Przekształcając nieco (tzn. dzieląc przez  $\epsilon_k^2$  i  $\epsilon_k^3$  odpowiednio) mamy:

$$\begin{aligned} \nu(\epsilon_k^{-1} + \epsilon_k)x_1 + x_2 &= E_k x_2 \\ \nu^2(\epsilon_k^{-2} + \epsilon_k^2)x_1 + \nu(\epsilon_k^{-1} + \epsilon_k)x_2 + U x_1 &= E_k x_1 \end{aligned}$$

co zapisujemy jako:

$$\begin{bmatrix} (2\nu \cos k) & (1 - E_k) \\ (2\nu^2 \cos 2k + U - E_k) & (2\nu \cos k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 0,$$

i standardowo, aby istniały nietrywialne rozwiązania, wyznacznik tego układu musi zniknąć, co prowadzi do warunku:

$$\begin{aligned} - \begin{vmatrix} (2\nu \cos k) & (1 - E_k) \\ (2\nu^2 \cos 2k + U - E_k) & (2\nu \cos k) \end{vmatrix} &= -4\nu^2 \cos^2 k + (1 - E_k)(2\nu^2 \cos 2k + U - E_k) \\ &= E^2 + (-4\nu^2 \cos^2 k + 2\nu^2 - U - 1) + U - 2\nu^2 = 0. \end{aligned} \quad (190)$$

W oczywisty sposób otrzymujemy rozwiązania:

$$\begin{aligned} E_k &= 2\nu^2 c^2 - \nu^2 + \frac{1}{2}(U + 1) \\ &\pm \frac{1}{2} \sqrt{16\nu^4 c^4 - 16\nu^4 c^2 + 8\nu^2 c^2 U + 8\nu^2 c^2 + 4\nu^4 - 4\nu^2 U + 4\nu^2 + U^2 - 2U + 1} \end{aligned} \quad (191)$$

(powyżej dla skrót u oznaczaliśmy  $c = \cos k$ ).

Wzór (191) wygląda dość obleśnie. Nie przekłada się to jednak na charakterystyki widma – wygląda ono podobnie jak dla Néela **RYS**..

Ale 'podrażmy' temat trochę dalej. Zapiszmy wzór (191) w postaci:

$$\begin{aligned} E_k &= \frac{1}{2} \left[ (1 + 4\nu^2 c^2) + (U - 2\nu^2) \right] \\ &\pm \frac{1}{2} \sqrt{(1 + 4\nu^2 c^2)^2 + 8\nu^2 c^2 (U - 2\nu^2) + (U - 2\nu^2)^2 - 2(U - 2\nu^2)}; \end{aligned} \quad (192)$$

i stąd widać, że gdy  $U = 2\nu^2$ , to wzory na energie bardzo się upraszczają, bo  $\Delta$  jest pełnym kwadratem, i z pierwiastka zostanie jedynie  $1 + 4\nu^2 c^2$ . Tak więc na górne pasmo otrzymujemy:

$$E_k^{(+)} = 1 + 4\nu^2 c^2, \quad (193)$$

a na dolne!! po prostu

$$E_k = 0; \quad (194)$$

tak więc *wszystkie energie z dolnego pasma* (a stanowią one połowę całego widma) *są identyczne*. Wykres tej sytuacji jest na **RYS**.. Jasna jest tu więc geneza nazwy 'flat-band dispersion'.

Później (hopefully) zobaczymy, jak taki kształt dyspersji wpływa na ferromagnetyczne własności stanu podstawowego.



## 9.10 Układy z brzegami swobodnymi – numeryka

## 10 Sieciowe układy dwuwymiarowe

### 10.1 Periodyczność w dwóch wymiarach

Rozważmy więc model cząstek swobodnych, skaczących po sieci *dwuwymiarowej* kwadratowej. Ham dla tego modelu jest analogiczny do Hama dla sytuacji jednowymiarowej (158), tzn.

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (195)$$

Jest to przypadek bez potencjału. Gdyby był obecny zewnętrzny potencjał, to dodalibyśmy jeszcze człon diagonalny (tzn. dla  $\mathbf{i} = \mathbf{j}$ ).

Zakładamy, że mamy do czynienia z siecią kwadratową  $N \times N$  węzłów (niewielkim nakładem pracy możemy zwiększyć ogólność i rozpatrywać sieć prostokątną). Nakładamy periodyczne warunki brzegowe w obu kierunkach.

W takim układzie mamy  $N^2$  węzłów. Zatem 1-cząstkowy wektor stanu ma  $N^2$  składowych, a rozwiązując problem jednocząstkowy mamy do czynienia z hamiltonianem, który jest macierzą  $N^2 \times N^2$ .

Składowe obiektów będzie w takim przypadku wygodnie opisywać za pomocą notacji, stowarzyszonej z opisem węzłów sieci. I tak, położenie na sieci oznaczamy 'grubymi' (boldface) literami, np.

$$\mathbf{R} = (R_1, R_2)$$

gdzie  $R_i$  oznacza wskaźnik numerujący węzły w kierunku  $i$ , przyjmującym tu wartości 1 (równie często oznaczanym jako  $x$ ) bądź 2 (odp.  $y$ ).

*Uwaga.* Gdy mamy do czynienia z sytuacją trójwymiarową, jedyną zmianą jest ta, że  $\mathbf{R}$  ma trzy składowe.

Wartości własne układu z periodycznymi warunkami brzegowymi można obliczyć używając dwuwymiarowej (dyskretnej) transformaty Fouriera. Wektory własne numerujemy wskaźnikiem  $\mathbf{k}$ , gdzie – jak i wyżej –  $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$ , zaś zakres zmienności obu wskaźników jest:

$$k_i = \frac{2\pi}{N}, \frac{4\pi}{N}, \dots, \frac{2\pi N}{N}.$$

Ansatz na wektory własne macierzy Hama z periodycznymi warunkami brzegowymi – analogon (154) z  $d = 1$  – napiszemy w następujący sposób.  $\mathbf{k}$ –ty wektor własny to  $v_{\mathbf{k}}$ , a jego  $\mathbf{s}$ –ta składowa to  $v_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{s})}$ . W/w Ansatz ma postać:

$$v_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{s})} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}}. \quad (196)$$

Tutaj:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{s} = k_1 s_1 + k_2 s_2$$

jest standardowym iloczynem skalarnym.

Okaże się zaraz, że Ansatz (213) jest rzeczywiście wektorem własnym dla dyskretnej transformacji Fouriera w dwóch wymiarach.

### 10.2 Sieć kwadratowa

Zakładamy, że przeskokki mają miejsce między najbliższymi sąsiadami (n.n.). Ponadto potencjał jest równy zero.

Przeskokki pokazuje **RYS.**.

### 10.2.1 Macierz Hama, widmo

Elementy macierzy Hama są więc:

$$H_{\mathbf{R},\mathbf{S}} = \begin{cases} -t & \text{dla } R_1 = S_1 \pm 1 & , & R_2 = S_2 \\ -t & \text{dla } R_1 = S_1 & , & R_2 = S_2 \pm 1 \\ 0 & \text{dla pozostałych } \mathbf{R}, \mathbf{S}. \end{cases} \quad (197)$$

Zadziałajmy powyższym Ham'em na wektor (213). Mamy:

$$\begin{aligned} (H v_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} &= -t(e^{ik_1(R_1-1)+ik_2R_2} + e^{ik_1(R_1+1)+ik_2R_2} + e^{ik_1R_1+ik_2(R_2+1)} + e^{ik_1R_1+ik_2(R_2-1)}) \\ &= -t(e^{-ik_1} + e^{ik_1} + e^{-ik_2} + e^{ik_2})e^{ik_1R_1+ik_2R_2} \\ &= -2t(\cos k_1 + \cos k_2)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \end{aligned} \quad (198)$$

Widać, że wektor postaci (213) rzeczywiście jest wektorem własnym.

Zatem! Dyspersja  $E(\mathbf{k})$  ma postać:

$$E(\mathbf{k}) \equiv E(k_1, k_2) = -2t(\cos k_1 + \cos k_2) \quad (199)$$

Popatrzmy tu na wykres 3d **RYS.**; ale w dalszych rachunkach będzie bardziej pomocny wykres warstwicowy **RYS.**.

### 10.2.2 Gęstość stanów w przypadku dwuwymiarowym

Musimy najspierw zdefiniować gęstość stanów, co będzie istotnie inne niż w przypadku jednowymiarowym, bo tam był to po prostu jacobian  $(1-d)$  zamiany zmiennych.

Aby umotywić definicję, Popatrzmy na wykres konturowy  $E(\mathbf{k})$  w otoczeniu minimum. **RYS.** Widać, że warstwy są topologicznie okręgami, aż do wartości  $E = 0$ . Ustawmy środek układu współrzędnych właśnie w minimum. Wprowadźmy teraz układ współrzędnych, możliwie podobny do układu zwykłych współrzędnych biegunowych na płaszczyźnie; chodzi nam o to, aby energia była zmienną *radialną* – analogonem zwykłego promienia. Drugą zmienną będzie jakiś analogon zmiennej kątowej. Widać, że możemy tak zrobić, bo warstwy  $E = \text{const.}$  są topologicznie okręgami. Tę zmienną oznaczymy symbolem  $\phi$ . Ten obrazek utrzymuje się w całym przedziale energii od  $E_{\min} = -4t$  aż do  $E = 0$ , chociaż im bliżej  $E = 0$ , tym warstwy bardziej przypominają kwadraty.

Mamy więc zamianę zmiennych:

$$(k_1, k_2) \longleftrightarrow (E, \phi); \quad (200)$$

za chwilę jawnie wypiszemy tę zamianę zmiennych.

Założmy teraz, że – tak jak uprzednio – obliczamy całkę z jakiejś funkcji  $f(k_1, k_2)$  po całej strefie Brillouina  $\mathcal{B}$ , która tu jest kwadratem:  $\mathcal{B} = [-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$ . Założmy, że  $f$  zależy wyłącznie od  $E$ , więc możemy napisać  $f(k_1, k_2) = \mathcal{F}(E)$ .

Naszym celem jest teraz wyliczenie całki po całej strefie Brillouina:

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{B}} \int f(k_1, k_2) dk_1 dk_2.$$

Wyliczymy tu (a raczej: przekształcimy, bo jawne wyliczenia będą za chwilę) najspierw całkę po fragmencie strefy  $\mathcal{B}_1$ , odpowiadającej zakresowi energii od  $-4t$  od 0, a pozostałym kawałkiem zajmiemy się za chwilę.

Mamy więc:

$$\begin{aligned}\mathcal{I} &= \int \int_{\mathcal{B}_1} f(k_1, k_2) dk_1 dk_2 \\ &= \int \int_{\tilde{\mathcal{B}}_1} \mathcal{F}(E) \left| \frac{\partial(k_1, k_2)}{\partial(E, \phi)} \right| dE d\phi,\end{aligned}\quad (201)$$

gdzie  $\tilde{\mathcal{B}}_1$  jest fragmentem strefy Brillouina  $\mathcal{B}_1$  opisanym we współrzędnych  $(E, \phi)$ , zaś

$$\frac{\partial(k_1, k_2)}{\partial(E, \phi)}$$

jest jacobianem zamiany zmiennych  $(k_1, k_2) \longleftrightarrow (E, \phi)$ . Zapiszmy dalej całkę (201) jako całkę iterowaną:

$$\mathcal{I} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \mathcal{F}(E) \int_0^{2\pi} d\phi \left| \frac{\partial(k_1, k_2)}{\partial(E, \phi)} \right| \equiv \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \mathcal{F}(E) \rho(E),$$

gdzie oznaczyliśmy

$$\rho(E) = \int_0^{2\pi} d\phi \left| \frac{\partial(k_1, k_2)}{\partial(E, \phi)} \right|; \quad (202)$$

jest to poszukiwana przez nas gęstość stanów.

Wzór (202) jest ogólną definicją gęstości stanów, w tych sytuacjach, gdzie działają poczynione założenia (tzn. mamy otoczenie minimum  $E(k_1, k_2)$  i możemy w tym otoczeniu wprowadzić zmienne: energia + kąt). Odłóżmy na razie na bok kwestię, czy w ten sposób można obliczyć gęstość stanów w całej strefie Brillouina, a wróćmy do przypadku sieci kwadratowej. Tu mamy szczególne symetrie. Zauważmy najspierw, że na brzegach  $b_1, b_2, b_3, b_4$  kwadratu o wierzchołkach:  $(0, \pm\pi)$  oraz  $(\pm\pi, 0)$  mamy  $E = 0$ . Łącznie ze znanymi własnościami symetrii funkcji  $\cos$ , widzimy, że na zbiorze  $[0, \pi] \times [0, \pi]$  funkcja  $E$  jest *antysymetryczna* względem odbicia względem brzegów  $b_i$ . To powoduje, że gęstość stanów  $\rho(E)$  jest *symetryczna* względem zamiany  $E \rightarrow -E$ . Wystarczy więc, że wyliczymy gęstość stanów jedynie dla  $E \in [-4t, 0]$ .

### 10.2.3 Gęstość stanów dla sieci kwadratowej – eliptysie

Wypiszmy ogólne wyrażenie na macierz Jacobiego:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial k_1}{\partial E} & \frac{\partial k_1}{\partial \phi} \\ \frac{\partial k_2}{\partial E} & \frac{\partial k_2}{\partial \phi} \end{bmatrix} \quad (203)$$

a do gęstości stanów wejdzie wyznacznik tejże macierzy.

Skonkretyzujmy teraz zamianę zmiennych. Zmienną 'radialną' będzie energia  $E$ . Do zdefiniowania 'kąta'  $\phi$ , zdefiniujmy najspierw zmienne  $x_1, x_2$ :

$$x_1 = \sqrt{1 - \cos k_1}, \quad x_2 = \sqrt{1 - \cos k_2}. \quad (204)$$

Jako zmienną kątową  $\phi$  bierzemy:

$$\phi = \arctg \left( \frac{x_2}{x_1} \right). \quad (205)$$



Widzimy, że

$$2t(x_1^2 + x_2^2 - 2) = E.$$

Oznaczmy:

$$E' = \frac{E}{2t}.$$

Mamy wtedy:

$$E' = -(\cos k_1 + \cos k_2).$$

Do znalezienia Jacobianu dogodnie będzie wyrazić  $k_1, k_2$  jako funkcje energii i kąta. (Można też inaczej, ale tu postąpimy w ten właśnie sposób).

Najpierw zauważmy, że

$$\operatorname{tg}^2 \phi = \frac{x_2^2}{x_1^2} = \frac{1 - \cos k_2}{1 - \cos k_1}, \quad (206)$$

skąd

$$1 - \cos k_2 = \operatorname{tg}^2 \phi (1 - \cos k_1);$$

i przekształcamy dalej:

$$-\cos k_2 = \operatorname{tg}^2 \phi - 1 - \operatorname{tg}^2 \phi \cos k_1 - \operatorname{tg}^2 \phi \cos k_2 + \operatorname{tg}^2 \phi \cos k_2,$$

$$(-1 - \operatorname{tg}^2 \phi) \cos k_2 = \operatorname{tg}^2 \phi - 1 - \operatorname{tg}^2 \phi (\cos k_1 + \cos k_2) = \operatorname{tg}^2 \phi - 1 + \operatorname{tg}^2 \phi E'.$$

Zatem:

$$\begin{aligned} \cos k_2 &= \frac{1 - \operatorname{tg}^2 \phi}{1 + \operatorname{tg}^2 \phi} + \frac{\operatorname{tg}^2 \phi}{1 + \operatorname{tg}^2 \phi} (-E') \\ &= \frac{\cos^2 \phi - \sin^2 \phi}{\cos^2 \phi + \sin^2 \phi} - \frac{\sin^2 \phi}{\cos^2 \phi + \sin^2 \phi} E' \\ &= \cos^2 \phi - \sin^2 \phi - E' \sin^2 \phi \\ &= 1 - (2 + E') \sin^2 \phi. \end{aligned}$$

Ostatecznie, aby nie zapomnieć, co liczyliśmy:

$$\cos k_2 = 1 - (2 + E') \sin^2 \phi. \quad (207)$$

Mamy więc załatwione wyrażenie  $k_2$  przez  $E', \phi$ . Robimy teraz podobny numer dla  $k_1$ . Z (206) mamy:

$$1 - \cos k_1 = \frac{1}{\operatorname{tg}^2 \phi} (1 - \cos^2 k_2) = (2 + E') \cos^2 \phi,$$

skąd

$$\cos k_1 = 1 - (2 + E') \cos^2 \phi. \quad (208)$$

Teraz musimy policzyć składniki Jacobianu. Mamy, po kolei:

$$\begin{aligned} \frac{\partial k_1}{\partial E} &= \frac{\partial k_1}{\partial(\cos k_1)} \frac{\partial(\cos k_1)}{\partial E'} \frac{\partial E'}{\partial E} \\ &= (-) \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_1}} (-) \cos^2 \phi \frac{1}{2t} = \frac{1}{2t} \cos^2 \phi \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_1}}; \end{aligned}$$

analogicznie (darujemy tu już sobie<sup>2</sup> bardziej szczegółowe reprodukcje poniższych wyników):

$$\begin{aligned}\frac{\partial k_2}{\partial E} &= \frac{1}{2t} \sin^2 \phi \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_2}}, \\ \frac{\partial k_1}{\partial \phi} &= -2 \sin \phi \cos \phi (2 + E') \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_1}}, \\ \frac{\partial k_2}{\partial \phi} &= +2 \sin \phi \cos \phi (2 + E') \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_2}}.\end{aligned}$$

Spójrzmy teraz na Jacobian:

$$|J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial k_1}{\partial E} & \frac{\partial k_1}{\partial \phi} \\ \frac{\partial k_2}{\partial E} & \frac{\partial k_2}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2t} \cos^2 \phi \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_1}} & -2 \sin \phi \cos \phi (2 + E') \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_1}} \\ \frac{1}{2t} \sin^2 \phi \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_2}} & +2 \sin \phi \cos \phi (2 + E') \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_2}} \end{vmatrix} = \dots$$

...wyłączamy odpowiednie czynniki z wierszy i kolumn...

$$= \frac{1}{2t} 2 \sin \phi \cos \phi (2 + E') \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_1}} \frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 k_2}} \begin{vmatrix} \cos^2 \phi & -1 \\ \sin^2 \phi & 1 \end{vmatrix} = \dots$$

A że mamy:

$$\begin{aligned}\sqrt{1 - \cos^2 k_1} &= \sqrt{1 - (1 - (2 + E') \cos^2 \phi)^2} = \sqrt{2(2 + E') \cos^2 \phi - (2 + E')^2 \cos^4 \phi} \\ &= \sqrt{2 + E'} \cos \phi \sqrt{2 - (2 + E') \cos^2 \phi}\end{aligned}$$

oraz

$$\sqrt{1 - \cos^2 k_2} = \sqrt{2 + E'} \cos \phi \sqrt{2 - (2 + E') \sin^2 \phi}$$

to razem

$$\begin{aligned}\dots &= \frac{1}{t \sqrt{2 - (2 + E') \sin^2 \phi} \sqrt{2 - (2 + E') \cos^2 \phi}} \frac{\sin \phi \cos \phi (2 + E')}{\sin \phi \cos \phi (2 + E')} \\ &= \frac{1}{-2E' + (2 + E')^2 \sin^2 \phi \cos^2 \phi}.\end{aligned}$$

Dokonajmy teraz zamiany zmiennej:  $\phi = \frac{1}{2}\theta$ ; mamy przy tym (zaraz to zapotrzebujemy)  $d\phi = \frac{1}{2}d\theta$ . Mamy więc jacobian:

$$|J| = \frac{1}{t} \frac{1}{\sqrt{-2E' + \frac{(2+E')^2}{4} \sin^2 \theta}}. \quad (209)$$

I teraz!!! Całkujemy go, aby dostać gęstość stanów:

$$\begin{aligned}\rho(E) &= \int_0^{2\pi} |J|(E, \phi) d\phi = 8 \int_0^{\pi/4} |J|(E, \phi) d\phi = \int_0^{\pi/2} |J|(E, \theta) d\theta \\ &= \frac{4}{t} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{-2E' + \frac{(2+E')^2}{4} \sin^2 \theta}} d\theta.\end{aligned} \quad (210)$$

<sup>2</sup>Podobnie jak Al – bohater negatywny z Toy Story 2 – darował sobie prysznic przed wyjazdem do Tokio

Doprowadźmy tę całkę do bardziej standardowej postaci. Weźmy zamianę zmiennych:

$$\tau = \frac{\pi}{2} - \theta \quad \text{oraz} \quad d\theta = -d\tau$$

i mamy w zmiennej  $\tau$ :

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{4}{t} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{-2E' + \frac{(2+E')^2}{4} \cos^2 \tau}} d\tau = \frac{4}{t} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{-2E' + \frac{(2+E')^2}{4} - \frac{(2+E')^2}{4} \sin^2 \tau}} d\tau \\ &= \frac{4}{t} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{\left(1 - E' + \frac{E'^2}{4}\right) - \frac{(2+E')^2}{4} \sin^2 \tau}} d\tau \\ &= \frac{4}{t} \frac{1}{\sqrt{1 - E' + \frac{E'^2}{4}}} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{(2+E')^2}{4-4E'+E'^2} \sin^2 \tau}} d\tau \end{aligned}$$

Przywołując znane definicje!!! mamy więc:

$$\rho(E) = \frac{4}{t} \frac{1}{\sqrt{1 - E' + \frac{E'^2}{4}}} K(\kappa), \quad (211)$$

gdzie

$$\kappa = \frac{2 + E'}{\sqrt{4 - 4E' + E'^2}} = \frac{2 + E'}{2 - E'}$$

zaś  $K(\kappa)$  jest całką eliptyczną drugiego rodzaju:

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}};$$

przypomnijmy jeszcze, że  $E'$  jest przeskalowaną energią:  $E' = \frac{E}{2t}$ .

Powyższy wzorek (211) jest słuszny dla  $E' \in [-2, 0]$ . Ale wzmiankowaliśmy uprzednio, że dla pozostałego zakresu  $E'$  tzn.  $E' \in [0, 2]$  mamy:  $\rho(E) = \rho(-E)$ .

Wykres gęstości stanów mamy na **RYŚ**.. Zwróćmy uwagę na następujące charakterystyczne cechy  $\rho(E)$ .

- Zachowanie  $\rho(E)$  w pobliżu granic dopuszczalnych wartości  $E$  (tzn.  $E = \pm 4t$ ) nie wykazuje osobliwości; wartość gęstości stanów  $\rho(\pm 4t)$  jest skończona. Kontrastuje to z sytuacją jednowymiarową, gdzie  $\rho(E)$  rozbiegała się przy zbliżaniu się do wartości granicznej  $E_{\text{gr}}$  (równiej  $E_{\text{gr}} = \pm 2t$  w przypadku przeskoków do najbliższych sąsiadów).
- Natomiast gęstość stanów w przypadku dwuwymiarowym jest rozbieżna *w środku pasma* (dla  $E = 0$ . Rozbieżność ma charakter *logarytmiczny*, co wynika z zachowania całki eliptycznej  $K(k)$  dla  $k$  bliskich 1.
- W przypadku przeskoków między najbliższymi sąsiadami, całka występująca w wyrażeniu na gęstość stanów dała się obliczyć analitycznie (sprowadziła się do całki eliptycznej). Dla bardziej skomplikowanych sytuacji, całka ta na ogół analitycznie nie da się już policzyć. Ale można wykonać tu dokładne całkowanie numeryczne – do wykonania mamy tu całkę jednowymiarową, którą numerycznie liczy się łatwo z dużą dokładnością.
- Ale kiedy można policzyć coś analitycznie, to na ogół warto to zrobić. Rozpatrzmy jeszcze dwie sytuacje, gdy udaje się policzyć analitycznie gęstość stanów.

### 10.3 Zwiększenie komórki elementarnej. Tworzenie pasm

Zajmiemy się tu prostym przypadkiem z potencjałem, a konkretnie, dwuwymiarową wersją potencjału Néela. Upřednio wprowadźmy jednak pojęcie sieci *dwudzielnej* (ang. *bipartite*). Jest to taka sieć, że możemy w niej wyróżnić dwie podsieci I i II o tej własności, że każdy węzeł typu I ma za sąsiadów wyłącznie węzły typu II i vice versa. Sieć kwadratowa jest dwudzielna, **RYS.**, także jest sieć sześciokątna, którą zajmiemy się niezadługo. Nie jest natomiast dwudzielną sieć trójkątna.

Na sieci kwadratowej okreśmy potencjał w ten sposób, że na węzłach typu I potencjał jest równy zeru, zaś na węzłach typu II jest on równy  $U$ . Taki potencjał, prócz nazwy Néela, czasem nazywa się też typu *szachownica* (ang. *checkerboard*). (See again **RYS.**)

Ham układu jednocząstkowego będzie więc wyglądał następująco:

$$H_{\mathbf{R}}^{\mathbf{S}} = \begin{cases} -t & \text{dla } R_1 = S_1 \pm 1 & , & R_2 = S_2 \\ -t & \text{dla } R_1 = S_1 & , & R_2 = S_2 \pm 1 \\ U & \text{dla } \mathbf{R} = \mathbf{S} \text{ oraz} & & \mathbf{R} \in \text{II} \\ 0 & \text{dla pozostałych } \mathbf{R}, \mathbf{S}. \end{cases} \quad (212)$$

#### 10.3.1 Widmo energetyczne

Obliczymy teraz wartości własne hamiltonianu. Zakładamy, że mamy periodyczne warunki brzegowe w obu kierunkach, oraz że ilość węzłów sieci w każdym kierunku jest parzysta.

Przez analogię z przypadkiem jednowymiarowym bierzemy następujący Ansatz na wektory własne:

$$v_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{s})} = \begin{cases} x_1 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}} & \text{dla } \mathbf{s} \in \text{I} \\ x_2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}} & \text{dla } \mathbf{s} \in \text{II} \end{cases} \quad (213)$$

Jak poprzednio,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{s} = k_1 s_1 + k_2 s_2.$$

$x_1, x_2$  są parametrami, które wyznaczymy z warunku zgodności.

Zadziałajmy więc Hamem (212) na wektor (213). Zaczniemy od podsieci I. Dostaniemy:

$$\begin{aligned} (Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} &= \sum_{\mathbf{R}'} H_{\mathbf{R}'}^{\mathbf{R}} v_{\mathbf{k}}^{\mathbf{R}'} \\ &= -tx_2 (e^{i(k_1(R_1+1)+k_2 R_2)} + e^{i(k_1(R_1-1)+k_2 R_2)} + e^{i(k_1 R_1+k_2(R_2+1))} + e^{i(k_1 R_1+k_2(R_2-1))}) \\ &= e^{i(k_1 R_1+k_2 R_2)} (-tx_2 (e^{ik_1} + e^{-ik_1} + e^{ik_2} + e^{-ik_2})) \\ &= -2tx_2 (\cos k_1 + \cos k_2) e^{i(k_1 R_1+k_2 R_2)} \\ &= E_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} x_1 e^{i(k_1 R_1+k_2 R_2)} \end{aligned} \quad (214)$$

(dwie ostatnie równości mają być spełniona, jeśli  $v_{\mathbf{k}}$  ma być wektorem własnym).

Teraz niech  $\mathbf{R}$  będzie węzłem podsieci II. Analogiczne rachunki prowadzą do równości:

$$\begin{aligned} (Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} &= [-2tx_1 (\cos k_1 + \cos k_2) + Ux_2] e^{i(k_1 R_1+k_2 R_2)} \\ &= E_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} x_2 e^{i(k_1 R_1+k_2 R_2)} \end{aligned} \quad (215)$$

Zapisując równości (214) i (215) nieco inaczej, otrzymamy, analogicznie jak to już parę razy dostawaliśmy dla sytuacji w  $d = 1$ :

$$\begin{bmatrix} E_{\mathbf{k}} & -2t(\cos k_1 + \cos k_2) \\ -2tx_1(\cos k_1 + \cos k_2) & (E_{\mathbf{k}} - U) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (216)$$

Dla istnienia nietrywialnego rozwiązania układu (216) wyznacznik układu musi znikać, co daje równanie

$$E_{\mathbf{k}}^2 - UE_{\mathbf{k}} - 4t^2(\cos k_1 + \cos k_2)^2 = 0. \quad (217)$$

Rozwiązaniami tego układu są:

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left( U \pm \sqrt{U^2 + 16t^2(\cos k_1 + \cos k_2)^2} \right). \quad (218)$$

Widać, że mamy przerwę energetyczną dla dowolnej niezerowej wartości  $U$ .

Funkcja  $E_{\mathbf{k}} \equiv E(\mathbf{k})$  jest – podobnie jak w przypadku jednowymiarowym – niejednoznaczna; i – podobnie jak tam – można ją ujednoznaczyć przez porównanie z przypadkiem  $U = 0$ . Dolne pasmo ma energie od energii minimalnej aż do zera, zaś górne – od  $U$  aż do energii maksymalnej.

### 10.3.2 Gęstość stanów

Wyznamy teraz gęstość stanów. Wystarczy ją policzyć w dolnym paśmie. Gęstości dla górnego i dolnego pasma są symetryczne (przy zamianie argumentu  $-E$  na  $U + E$ ).

Postępujemy bardzo podobnie, jak w przypadku bez potencjału. Chcemy przejść od zmiennych 'kartezjańskich'  $k_1, k_2$  do 'biegunowych'  $E, \phi$ , w jedną i drugą stronę ('w te i we wte').

Najsampierw, wprowadzamy zmienne  $x_1, x_2, \phi$  (nie mylić z parametrami  $x_1, x_2$  z poprzedniej Subsubsection!):

$$x_1 = \sqrt{1 - \cos k_1}, \quad x_2 = \sqrt{1 - \cos k_2}, \quad (219)$$

i za ich pomocą definiujemy zmienną 'kątową'  $\phi$ :

$$\phi = \arctg \left( \frac{x_2}{x_1} \right). \quad (220)$$

Oznaczmy ponadto:

$$T = \operatorname{tg} \phi, \quad A = \frac{1}{2t} \sqrt{E(E - U)}, \quad B = \frac{\partial A}{\partial E} = \frac{1}{2t} \frac{2E - U}{2\sqrt{E(E - U)}} \quad (221)$$

oraz

$$c_1 = \cos k_1, \quad c_2 = \cos k_2. \quad (222)$$

Łatwo zobaczyć z (217), że

$$A = c_1 + c_2.$$

Mamy:

$$T^2 = \frac{1 - c_2}{1 - c_1}$$

i wyciągamy stąd  $c_2$ :

$$c_2 = 1 - T^2 + T^2 c_1$$

i wstawiamy do  $A$ , co daje:

$$c_1 + 1 - T^2 + T^2 c_1 = A$$

skąd mamy:

$$c_1 = \frac{1}{1 + T^2} A + \frac{T^2 - 1}{T^2 + 1} = A \cos^2 \phi - \cos 2\phi. \quad (223)$$

Dalej, na  $c_2$  mamy:

$$c_2 = A - c_1 = A - A \cos^2 \phi + \cos 2\phi = A \sin^2 \phi + \cos 2\phi. \quad (224)$$

Prawie już mamy odwrócenie zamiany zmiennych:

$$\begin{aligned} c_1 &= A \cos^2 \phi - \cos 2\phi, \\ c_2 &= A \sin^2 \phi + \cos 2\phi, \end{aligned}$$

i już finalnie otrzymujemy szukane wyrażenie na odwrócenie zamiany zmiennych:

$$\begin{aligned} k_1 &= \arccos (A \cos^2 \phi - \cos 2\phi), \\ k_2 &= \arccos (A \sin^2 \phi + \cos 2\phi). \end{aligned}$$

Przypomnijmy sobie ogólne wyrażenie na jacobian (203). Liczymy po kolei wszystkie elementy wyznacznika:

$$\frac{\partial k_1}{\partial E} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_1^2}} \frac{\partial c_1}{\partial E} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_1^2}} \cos^2 \phi \frac{\partial A}{\partial E} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_1^2}} B \cos^2 \phi.$$

Podobnie:

$$\frac{\partial k_2}{\partial E} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} B \sin^2 \phi$$

Dalej:

$$\frac{\partial k_1}{\partial \phi} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_1^2}} \frac{\partial c_1}{\partial \phi} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} (2-A) \sin 2\phi$$

oraz

$$\frac{\partial k_2}{\partial \phi} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} \frac{\partial c_2}{\partial \phi} = -\frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} (A-2) \sin 2\phi$$

Mamy więc dla Jacobianu:

$$\begin{aligned} |J| &= \begin{vmatrix} \frac{\partial k_1}{\partial E} & \frac{\partial k_1}{\partial \phi} \\ \frac{\partial k_2}{\partial E} & \frac{\partial k_2}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\frac{1}{\sqrt{1-c_1^2}} B \cos^2 \phi & -\frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} (2-A) \sin 2\phi \\ -\frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} B \sin^2 \phi & -\frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} (A-2) \sin 2\phi \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-c_1^2}} \frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} B (A-2) \sin 2\phi. \end{aligned} \quad (225)$$

Policzmy wyrażenie z pierwiastkiem:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{1-c_1^2}} \frac{1}{\sqrt{1-c_2^2}} &= \frac{1}{\sqrt{(1-c_1)(1+c_1)(1-c_2)(1+c_2)}} = \frac{1}{(1-c_2)\sqrt{1+c_1}\sqrt{1+c_2}} \sqrt{\frac{1-c_2}{1-c_1}} \\ &= \frac{1}{(1-c_2)\sqrt{1+c_1}\sqrt{1+c_2}} \frac{\sin \phi}{\cos \phi} \end{aligned}$$

Musimy jeszcze powyliczać dalsze kawałki:

$$1 - c_2 = 1 - A \sin^2 \phi - \cos^2 \phi + \sin^2 \phi = \sin^2 \phi (2 - A);$$

oraz

$$\begin{aligned}
(1 + c_1)(1 + c_2) &= (A \sin^2 \phi + 2 \cos^2 \phi)(A \cos^2 \phi + 2 \sin^2 \phi) \\
&= A^2 \sin^2 \phi \cos^2 \phi + 2A(\sin^4 \phi + \cos^4 \phi) + 4 \sin^2 \phi \cos^2 \phi \\
&= (1 - A + \frac{1}{4}A^2) \sin^2 2\phi + 2A.
\end{aligned}$$

Podstawiając wszystko do wyrażenia na Jacobian otrzymamy:

$$|J| = -\frac{2B}{\sqrt{2A + (1 - A + \frac{1}{4}A^2) \sin^2 2\phi}} \quad (226)$$

Pomanipulujmy nieco wyrażeniem PODPIERwiastkowym:

$$\begin{aligned}
2A + (1 - A + \frac{1}{4}A^2) \sin^2 2\phi &= 2A + 1 - A + \frac{1}{4}A^2 - (1 - A + \frac{1}{4}A^2) \cos^2 \phi \\
&= \left(1 + \frac{1}{2}A\right)^2 - \left(1 - \frac{1}{2}A\right)^2 \cos^2 2\phi \\
&= \left(1 + \frac{1}{2}A\right)^2 \left[1 - \left(\frac{2 - A}{2 + A}\right)^2\right] \cos^2 2\phi
\end{aligned}$$

Wprowadzając teraz naturalny parametr:

$$\kappa = \frac{2 - A}{2 + A} \quad (227)$$

otrzymujemy wyrażenie na gęstość stanów:

$$\rho(E) = \int_0^{2\pi} |J| d\phi = 8 \int_0^{\pi/4} |J| d\phi$$

Wprowadzamy zmienną:

$$\theta = 2\phi, \implies d\phi = \frac{1}{2}d\theta, \implies \int_0^{\pi/4} \dots d\phi = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} \dots d\theta$$

i mamy:

$$\rho(E) = -\frac{8B}{1 + \frac{1}{2}A} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \theta}} d\theta = -\frac{16B}{2 + A} K(\kappa)$$

gdzie  $K(\kappa)$  jest całką eliptyczną drugiego rodzaju, której definicję przypomnieliśmy już wcześniej.

W powyższych przekształceniach skorzystaliśmy też z faktu, że

$$\cos(\theta) = \sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)$$

Podsumujmy zatem, aby mieć wszystkie niezbędne symbole razem:

$$\rho(E) = -\frac{16B}{2 + A} K(\kappa), \quad (228)$$

a wielkości  $\kappa, A, B$  oznaczają:  $\kappa$  jest dana ciut powyżej (227), zaś

$$A = \frac{1}{2t} \sqrt{E(E - U)}, \quad B = \frac{\partial A}{\partial E} = \frac{1}{2t} \frac{2E - U}{2\sqrt{E(E - U)}}.$$

## 10.4 Sieć sześciokątna; widmo grafenu

Im wyższy wymiar, tym (najczęściej) więcej możliwości geometrycznych. W dwóch wymiarach rozpatrzmy teraz kolejny ważny przykład – sieci *sześciokątnej* (heksagonalnej). Rozpatrzmy teraz widmo jednocząstkowe takiej sieci, a ważność implikacji takiej postaci widma dla zastosowań fragmentarycznie omówimy później.

Sieć heksagonalną **RYS**. możemy rozpatrywać jako kwadratową, z odpowiednimi stałymi sprężenia **RYS**. Rozpatrzmy nieco ogólniejszy model z dwiema stałymi przeskoku  $t, t'$  **RYS**., ilustracja też na sieci kwadratowej **RYS**. aby móc przez ciągłość przejść do sieci kwadratowej. Sieć sześciokątną otrzymujemy dla  $t' = 0$ , zaś sieć kwadratową dla  $t = t'$ .

Mamy więc dwa rodzaje węzłów: węzły typu  $A$ , z którego wiązanie ze stałą  $t'$  sterczy w dół, oraz typu  $B$  – tu wiązanie ze stałą  $t'$  sterczy w górę. **RYS**.. Widzimy, że we wszystkich rzędkach poziomych mamy stałą  $t$ , a w rzędkach pionowych stałe  $t$  oraz  $t'$  przeplatają się.

Mamy więc następującą macierz Hama:

$$H_{\mathbf{R}}^{\mathbf{S}} = \begin{cases} -t & \text{dla } R_1 = S_1 \pm 1, \quad R_2 = S_2 \\ -t & \text{dla } \mathbf{R} \in A, \quad R_1 = S_1, \quad S_2 = R_2 + 1 \\ -t' & \text{dla } \mathbf{R} \in A, \quad R_1 = S_1, \quad S_2 = R_2 - 1 \\ -t & \text{dla } \mathbf{R} \in B, \quad R_1 = S_1, \quad S_2 = R_2 - 1 \\ -t' & \text{dla } \mathbf{R} \in B, \quad R_1 = S_1, \quad S_2 = R_2 + 1 \end{cases} \quad (229)$$

Ansatz na wektor własny weźmiemy analogicznie jak dla potencjału Néela  $\mathbf{R}$ –ta składowa  $\mathbf{k}$ –tego wektora jest:

$$v_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{R})} = \begin{cases} x_A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} & \text{dla } \mathbf{R} \in A \\ x_B e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} & \text{dla } \mathbf{R} \in B \end{cases} \quad (230)$$

Po podzieleniu Ham'em o elementach macierzowych (229) na wektor o składowych (230) otrzymamy wyrażenia następującą równość składowych wektorów w równaniu na wartości własne:

Dla przypadku, gdy  $\mathbf{R} \in A$ :

$$(Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left( -t \underbrace{\epsilon_1^{-1} x_B}_L - t \underbrace{\epsilon_1 x_B}_R - t \underbrace{\epsilon_2 x_B}_U - t' \underbrace{\epsilon_2^{-1} x_B}_D \right) = E_{\mathbf{k}} x_A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (231)$$

Dla przypadku, gdy  $\mathbf{R} \in B$ :

$$(Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left( -t \underbrace{\epsilon_1^{-1} x_A}_L - t \underbrace{\epsilon_1 x_A}_R - t' \underbrace{\epsilon_2 x_A}_U - t \underbrace{\epsilon_2^{-1} x_A}_D \right) = E_{\mathbf{k}} x_B e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}. \quad (232)$$

Powyżej oznaczyliśmy:

$$\epsilon_1 = e^{ik_1}, \quad \epsilon_2 = e^{ik_2}.$$

Po ewidentnej zamianie  $\epsilon_1 + \epsilon_1^{-1} = 2 \cos k_1$  otrzymujemy macierzową wersję warunków (231) i (232):

$$\begin{bmatrix} E_{\mathbf{k}} & -2t \cos k_1 - (t\epsilon_2 + t'\epsilon_2^{-1}) \\ -2t \cos k_1 - (t\epsilon_2^{-1} + t'\epsilon_2) & E_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_A \\ x_B \end{bmatrix} = 0 \quad (233)$$

Ze standardowego warunku znikania wyznacznika układu równań (233) otrzymamy:

$$0 = E^2 - \left[ 4t^2 \cos^2 k_1 + 2t \cos k_1 (t\epsilon_2 + t'\epsilon_2 + t\epsilon_2^{-1} + t'\epsilon_2^{-1}) + (t^2 + t\epsilon_2^{-2} + t\epsilon_2^2 + t'^2) \right]$$



$$= E^2 - \left[ 4t^2 \cos^2 k_1 + 2t \cos k_1 2(t + t') \cos k_2 + (t^2 + t'^2) + 2tt' \cos 2k_2 \right],$$

tzn.

$$E^2 = \left[ 4t^2 \cos^2 k_1 + 4t(t + t') \cos k_1 \cos k_2 + 4tt' \cos^2 k_2 + (t^2 + t'^2 - 2tt') \right]. \quad (234)$$

No to teraz, z wzoru (234) mamy:

- Dla  $t' = t$ :

$$E_k = 4t^2 (\cos k_1 + \cos k_2)^2$$

czyli to samo co dla sieci kwadratowej. (Oczywiście trzeba powybierać odpowiednie gałęzie pierwiastka).

- Dla  $t' = 0$ :

$$E_k^2 = t^2 [4 \cos k_1 (\cos k_1 + \cos k_2) + 1] \quad (235)$$

Przed wyciąganiem pierwiastka, warto się zorientować, jakie są rodzaje punktów krytycznych  $E_k^2$ . Funkcja do zbadania jest prosta (dobre ćwiczenie np. na Analizę I, p. też Zadania) i jako wynik mamy, na zbiorze  $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$  i potem periodycznie w obu kierunkach:

1. W narożach oraz w środku, tzn. w punktach:  $(0, 0)$ ,  $(0, 2\pi)$ ,  $(2\pi, 0)$ ,  $(2\pi, 2\pi)$  oraz  $(\pi, \pi)$  są *maksima*; tam wartość  $E_k^2 = 9$ .
2. Jest trochę siodeł:  $(\pi, 0)$ ,  $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ ,  $(\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ ,  $(0, \pi)$ ,  $(2\pi, \pi)$ ,  $(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ ,  $(\frac{3\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ ,  $(\pi, 2\pi)$ . Wszędzie tam wartość  $E_k^2$  wynosi 1.
3. I wreszcie w punktach  $(\frac{2\pi}{3}, 0)$ ,  $(\frac{4\pi}{3}, 0)$ ,  $(\frac{\pi}{3}, \pi)$ ,  $(\frac{5\pi}{3}, \pi)$ ,  $(\frac{2\pi}{3}, 2\pi)$ ,  $(\frac{4\pi}{3}, 2\pi)$ , są *minima*. Tam wartość  $E_k^2$  wynosi 0.

Widać więc, że nie będzie żadnych zabronionych wartości energii, i widmo energetyczne ma postać:

$$E_k = \pm t \sqrt{4 \cos k_1 (\cos k_1 + \cos k_2) + 1} \quad (236)$$

Zastanówmy się teraz, jak będzie wyglądało widmo  $E_k$  dla energii bliskich zeru? Otóż jeśli mamy funkcję, wyglądającą lokalnie jak funkcja kwadratowa:  $f(x, y) = x^2 + y^2$  (wykresem jest paraboloida) i wyciągniemy z niej pierwiastek, to otrzymamy *stożek*. Tak więc lokalnie wygląda widmo  $E(k_1, k_2)$  w pobliżu minimów wymienionych powyżej.

Widać to na **RYS.**; zamieściliśmy też wykres konturowy.

Taka zależność  $E_k$  jest podobna do dyspersji bezmasowych cząstek opisanych równaniem Diraca.

Układ, który z dobrym przybliżeniem jest opisany przez model cząstek swobodnych na sieci sześciokątnej, to *grafen* – pojedyncza warstwa grafitu. Fakt, że widmo energetyczne ma postać stożka, jest bardzo ważne dla zastosowań – stąd np. wynika duże przewodnictwo grafenu.

Ważność potencjalnych zastosowań grafenu spowodowała intensywne badania nad nim, zarówno teoretyczne, jak i doświadczalne. Odkrywczy grafenu (Geim & Novoselov) uhonorowani zostali nagrodą Nobla z fizyki w r. 2010.

## 10.5 Układ wykazujący przejście metal-izolator

Tutaj rozpatrzmy układ na sieci kwadratowej, z potencjałem, który autor nazywa 'Néel 3'. Dokładniejsza nazwa byłaby 'potencjał ukośnej fazy wstępowej o okresie 3', **RYS.** ale dla krótkości nazwiemy ją właśnie Néel 3. Motywacja tej nazwy jest raczej naturalna – podobieństwo do zwykłego potencjału Néela, gdzie mamy ukośne rzędy węzłów powtarzające się z okresem 2.

Mamy więc tu naturalne wyróżnione trzy rodzaje węzłów: I, II, III. Na węzłach typu III mamy potencjał  $U$ , na pozostałych zero.

Ham będzie więc dany as follows:

$$H_{\mathbf{R}}^{\mathbf{S}} = \begin{cases} -t & \text{dla } \mathbf{R}, \mathbf{S} : d(\mathbf{R}, \mathbf{S}) = 1 \\ U & \text{dla } \mathbf{R} \in \text{III} \\ 0 & \text{w pozostałych przypadkach.} \end{cases} \quad (237)$$

Tutaj  $d(\mathbf{R}, \mathbf{S})$  oznacza odległość 'sieciovą', tzn.  $d(\mathbf{R}, \mathbf{S}) = 1$ , gdy  $\mathbf{R}$  oraz  $\mathbf{S}$  są najbliższymi sąsiadami.

Ansatz na wektory własne dla Hama danego przez (237) weźmiemy przez analogię do Ansatzu na wektory własne dla potencjału Néela (213), tyle że o okresie 3. Weźmy więc:

$$v_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{s})} = \begin{cases} x_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} & \text{dla } \mathbf{s} \in \text{I} \\ x_2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} & \text{dla } \mathbf{s} \in \text{II} \\ x_3 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} & \text{dla } \mathbf{s} \in \text{III} \end{cases} \quad (238)$$

Zakładamy też – jak zwykle w takich przypadkach – że mamy sieć o rozmiarze  $3n \times 3n$  oraz nakładamy periodyczne warunki brzegowe.

Działając Hamem (237) na wektor (238), dostajemy, po kolei, dla węzłów typu I, II, III (p. **RYS.**):

1. Węzeł I:

$$\begin{aligned} (Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} &= \sum_{\mathbf{R}'} H_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} v_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{R}')} \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left( \underbrace{-t x_3 e^{-ik_1}}_L \underbrace{-t x_2 e^{ik_1}}_R \underbrace{-t x_3 e^{ik_2}}_U \underbrace{-t x_2 e^{-ik_2}}_D \right) = E_{\mathbf{k}} x_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \end{aligned}$$

2. Węzeł II:

$$(Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left( \underbrace{-t x_1 e^{-ik_1}}_L \underbrace{-t x_3 e^{ik_1}}_R \underbrace{-t x_1 e^{ik_2}}_U \underbrace{-t x_3 e^{-ik_2}}_D \right) = E_{\mathbf{k}} x_2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}};$$

3. Węzeł III:

$$(Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left( \underbrace{-t x_2 e^{-ik_1}}_L \underbrace{-t x_1 e^{ik_1}}_R \underbrace{-t x_2 e^{ik_2}}_U \underbrace{-t x_1 e^{-ik_2}}_D + U x_3 \right) = E_{\mathbf{k}} x_3 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}.$$

Przepisujemy powyższe warunki w postaci układu równań:

$$\begin{bmatrix} E_{\mathbf{k}} & t(e^{ik_1} + e^{-ik_2}) & t(e^{-ik_1} + e^{ik_2}) \\ t(e^{-ik_1} + e^{ik_2}) & E_{\mathbf{k}} & t(e^{ik_1} + e^{-ik_2}) \\ t(e^{ik_1} + e^{-ik_2}) & t(e^{-ik_1} + e^{ik_2}) & E_{\mathbf{k}} - U \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad (239)$$

Standardowy warunek zerowania się wyznacznika układu równań (239) daje równanie na  $E_{\mathbf{k}}$ :

$$E_{\mathbf{k}}^3 - UE_{\mathbf{k}}^2 - 6t^2(1 + \cos(k_1 + k_2))E_{\mathbf{k}} + 2t^2U(1 + \cos(k_1 + k_2)) + 2t^3(\cos 3k_1 + \cos 3k_2) + 6t^3(\cos(k_1 - 2k_2) + \cos(k_2 - 2k_1)) = 0. \quad (240)$$

Aby zobaczyć strukturę pasm, należy z tego równania wywlekać  $E_{\mathbf{k}}$ , co prowadzi do wzorów Cardano – wygląda, że tym razem jest to nieuniknione, a nie należy się spodziewać możliwości zaatakowania problemu od innej strony, tak jak to było w jednym wymiarze.

Zrezygnujemy tu ze ścisłości, poświęcając ją dla pogładowości, i wykreślimy numerycznie energię jako funkcję quasipędu  $\mathbf{k}$ .

Wynik okazuje się być zależny od  $U$ . W badanym przez nas zakresie  $U$ , dla małych  $U$  (od 0 do kilku  $t$ ) dwa dolne pasma zawsze mają wspólną wartość energii. Inaczej jest z trzecim pasmem. Dla  $0 < U < 2t$ , zbiór wartości energii jest spójny (jest jednym odcinkiem). Dla  $U > 2t$ , jest on niespójny – są dwa odcinki, tzn. są dwa pasma energetyczne, przedzielone przerwą. Ewolucję pasm można prześledzić na **RYS...**

Mamy tu do czynienia ze zjawiskiem zwanym *przejściem metal-izolator* (MIT).

## 10.6 Kagomiak jako przykład flat-band dispersion

Jedną z dość ważnych sieci dwuwymiarowych jest *sieć kagomé*. Sieć ta jest złożona z trójkątów odpowiednio przemieszanych z sześciokątami **RYS**. Będziemy chcieli teraz policzyć dyspersję  $E_{\mathbf{k}}$  na sieci kagomé.

Każdą sieć periodyczną w  $d$  wymiarach można odpowiednio odwzorować na  $\mathbb{Z}^d$ . Robiliśmy tak już z siecią sześciokątną. Uczyńmy tak i z siecią kagomé. Najsamprzód, aby sobie trochę ułatwić sprawę, wyróżnijmy na sieci trzy rodzaje węzłów **RYS**.. Następnie, węzły 'kwadratowe' powpychajmy do rzędka o jeden niżej, pomiędzy węzły okrągłe 'białe' i 'czarne'. W ten sposób otrzymamy sieć kwadratową o trzech rodzajach węzłów i stałych przeskoku między węzłami jak na **RYS**..

Aby było trudniej o pomyłkę, wypiszmy połączenia poszczególnych rodzajów węzłów:

1. *Węzeł typu I:*

$$\mathbf{R} = (R_1, R_2) \text{ jest połączony z } \begin{cases} (R_1 - 1, R_2) & \text{typu III} \\ (R_1 + 1, R_2) & \text{typu II} \\ (R_1 + 2, R_2) & \text{typu III} \\ (R_1 + 1, R_2 - 1) & \text{typu II} \end{cases}$$

2. *Węzeł typu II:*

$$\mathbf{R} = (R_1, R_2) \text{ jest połączony z } \begin{cases} (R_1 - 2, R_2 + 1) & \text{typu III} \\ (R_1 - 1, R_2 + 1) & \text{typu I} \\ (R_1 - 1, R_2) & \text{typu I} \\ (R_1 + 1, R_2) & \text{typu III} \end{cases}$$

3. *Węzeł typu III:*

$$\mathbf{R} = (R_1, R_2) \text{ jest połączony z } \begin{cases} (R_1 - 1, R_2) & \text{typu II} \\ (R_1 - 2, R_2) & \text{typu I} \\ (R_1 + 1, R_2) & \text{typu I} \\ (R_1 + 2, R_2 - 1) & \text{typu II} \end{cases}$$

Tak więc dla poszczególnych rodzajów węzłów mamy następujące wyrażenia na składowe wektorów  $Hv_{\mathbf{k}}$ :

1. Węzeł typu I:

$$(Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} = -t \left( e^{-ik_1} x_3 + e^{ik_1} x_2 + e^{2ik_1} x_3 + e^{ik_1} e^{-ik_2} x_2 \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = E_{\mathbf{k}} x_1 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$$

2. Węzeł typu II:

$$(Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} = -t \left( e^{-2ik_1} e^{ik_2} x_3 + e^{-ik_1} e^{ik_2} x_1 + e^{-ik_1} x_1 + e^{ik_1} x_3 \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = E_{\mathbf{k}} x_2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$$

3. Węzeł typu III:

$$(Hv_{\mathbf{k}})^{\mathbf{R}} = -t \left( e^{-ik_1} x_2 + e^{-2ik_2} x_1 + e^{ik_1} x_1 + e^{2ik_1} e^{-ik_2} x_2 \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = E_{\mathbf{k}} x_3 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$$

Te 3 równania – jak to już było wielokrotnie – zapiszemy w postaci układu równań:

$$\begin{bmatrix} E_{\mathbf{k}} & t(e^{ik_1} + e^{ik_1} e^{-ik_2}) & t(e^{-ik_1} + e^{ik_2}) \\ t(e^{-ik_1} e^{ik_2} + e^{-ik_1}) & E_{\mathbf{k}} & t(e^{ik_1} + e^{-2ik_1} e^{ik_2}) \\ t(e^{ik_1} + e^{-ik_2}) & t(e^{-ik_1} + e^{2ik_1} e^{-ik_2}) & E_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (241)$$

Aby miał on niezerowe rozwiązanie, musi zniknąć wyznacznik tego układu:

Otrzymujemy stąd równanie na  $E_{\mathbf{k}}$ :

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}}^3 - 2t^2 (3 + \cos k_2 + \cos 3k_1 + \cos(3k_1 - k_2)) E_{\mathbf{k}} \\ + 4t^3 (1 + \cos(k_2) + \cos(3k_1) + \cos(3k_1 - k_2)) = 0 \end{aligned} \quad (242)$$

I teraz!! Nie trzeba sięgać do wzorów Cardano, aby je rozwiązać! Chwila zastanowienia (albo program symboliczny) wystarczy, aby zorientować się, jak wyglądają rozwiązania:

$$E_{\mathbf{k}}^{(0)} = 2t, \quad (243)$$

$$E_{\mathbf{k}}^{(1)} = t \left( -1 - \sqrt{3 + 2 \cos k_2 + 2 \cos 3k_1 + 2 \cos(3k_1 - k_2)} \right), \quad (244)$$

$$E_{\mathbf{k}}^{(2)} = t \left( -1 - \sqrt{3 + 2 \cos k_2 + 2 \cos 3k_1 + 2 \cos(3k_1 - k_2)} \right), \quad (245)$$

Mamy więc trzy pasma, z których jedno jest *całkowicie bezdyspersyjne!* (płaskie – całkowicie zdegenerowane; wszystkie stany należące do tego pasma mają taką samą energię).

## 10.7 Układy z brzegami swobodnymi, lub innymi – numeryka

### 10.7.1 Kiedy trzeba wyjść poza transformację Fouriera

W całej Section 7, podstawowym narzędziem diagonalizacji hamiltonianu i uzyskiwania informacji na temat widma była *dyskretna transformacja Fouriera*. Jest to narzędzie nie do przecenienia i widzieliśmy, jak wiele różnych sytuacji można było przeanalizować używając jednej tylko metody.

Nie ma jednakże jednego uniwersalnego narzędzia do *każdego* problemu. W naszym przypadku, aby zastosować transformację Fouriera, trzeba było nałożyć *periodyczne warunki brzegowe*. W rzeczywistości, rzadko mamy do czynienia z sytuacjami prowadzącymi do

periodycznych warunków brzegowych. Częstszą sytuacją są np. warunki typu 'ściana' (nieskończony, bądź bardzo duży, potencjał na pierwszym i ostatnim węźle) lub 'otwarte'.

Układy takie dadzą się przeanalizować ściśle, ale jest to znacznie trudniejsze niż zastosowanie transformaty Fouriera. Powstaje więc pytanie, czy opłaca się 'skórka za wyprawkę', tzn. czy musimy wkładać znaczny wysiłek, aby wyjść poza transformację Fouriera.

Odpowiedź zależy od rodzaju problemu, z jakim mamy do czynienia. Jeśli np. rozpatrujemy spore układy (umownie, kilkadziesiąt węzłów lub więcej) oraz własności typu 'bulk' (tzn. np. średnią energię w przeliczeniu na jeden węzeł) to naturalne wydaje się przypuszczenie, że najistotniejsze jest to, co się dzieje 'w środku', a to co 'na brzegach' ma znaczenie o wiele mniejsze, i dlatego własności typu 'bulk' nie powinny zależeć od warunków brzegowych. W wielu przypadkach takie stwierdzenia można nawet przemienić w twierdzenia i udowodnić (twierdzenia o istnieniu granicy termodynamicznej).

Na ogół znacznie trudniejsze, choć czasem wykonalne, jest policzenie, jak się zachowuje układ o dużych ale skończonych rozmiarach – dokładniej, na ile własności tego układu są różne od własności układu nieskończonego. Jest to treścią teorii tzw. *Finite Size Scaling*.

Czasem jednak jesteśmy zainteresowani innymi problemami, np. zjawiskami *brzegowymi*. Wtedy już transformaty Fouriera nie możemy stosować.

Inna sytuacja, to gdy mamy skończony i dość mały układ, dla skonkretyzowania – kropka kwantowa o rozmiarze kilku nm. Tu już 'finite-size effects' mogą mieć znaczenie, i niejednokrotnie własności kropek kwantowych różnią się znacznie od własności 'bulk'.

W takich przypadkach trzeba sięgnąć po jakąś dopełniającą metodę – taką uniwersalną metodą jest *ściśła diagonalizacja* macierzy hamiltonianu.

### 10.7.2 O metodach diagonalizacji słów (prawie dosłownie) kilka

Z numerycznego punktu widzenia, musimy obliczyć wartości własne i być może wektory własne macierzy *rzeczywistej symetrycznej* – takie przypadki spotykaliśmy dotąd, oraz *zespolonej hermitowskiej* – to na wyrost, ale takie sytuacje też się spotyka.

Faktami, bardzo ułatwiającym zarówno teoretycznie, jak i numerycznie mieć do czynienia z takimi macierzami, są:

1. Wartości własne operatorów hermitowskich są rzeczywiste;
2. Układ wektorów własnych jest *zupełny*, tzn. mogą one tworzyć bazę;
3. Wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne.

Obie sytuacje są dobrze rozpracowane z punktu widzenia algorytmów i ich implementacji. Dobre omówienie algorytmów można znaleźć w [10].

Implementacje są bardzo rozpowszechnione. Pierwsze z brzegu przykłady, to wzmiankowane wyżej procedury Jacobiego oraz Hessenberga są w [10] (odpowiednio *jacobi* oraz *tred + tqli*, implementacje są w Fortranach, C, C++); implementacje typu 'black-box' są w pakietach Python'owych (*numpy*, *scipy*), w pakietach MatLab, Maple, Mathematica i wielu innych.

Naturalnym ograniczeniem tych procedur jest *ilość operacji* potrzebna do znalezienia widma. W powyższych algorytmach jest ona proporcjonalna do  $N^3$  ( $N$  – rozmiar macierzy). W praktyce, na standardowym PC można w rozsądnym czasie (kilkanaście minut do kilku godzin) zdiagonalizować macierz  $5000 \times 5000$ . Można 'pójść' powyżej tego rozmiaru, ale już niewiele.

W tych procedurach uzyskuje się *całe* widmo i – jako opcję – wszystkie wektory własne. Często *nie jest* potrzebne całe widmo – wystarczy kilka wartości oraz wektorów własnych (np. górny albo dolny fragment widma). Algorytm, który liczy tylko fragment widma oraz (opcjonalnie) odpowiadające mu wektory własne, to *metoda Lanczosa* i jej rozszerzenia. Pakiety implementujące metodę Lanczosa są mniej popularne niż te do ścisłej diagonalizacji z pełnym widmem oraz kompletem wektorów własnych, ale jest ich sporo. Jednym z nich to ARPACK (Fortran, C++), inny to ALPS – cały zestaw procedur do ścisłej diagonalizacji oraz mechaniki statystycznej.

### 10.7.3 Rysunki

$d = 1$ :

1. Łańcuch z przeskokami do najbliższych sąsiadów, o.b.c. i p.b.c – porównanie dla różnych  $N$
2. Łańcuch
3. Łańcuch z potencjałem o okresie 3, o.b.c.
4. PIŁA : Płaskodenka i niepłaskodenka

$d = 2$ :

1. Sieć kwadratowa, o.b.c. Generalnie: Sytuacja o wiele mniej wyrazista niż w  $d = 1$
2. Néel, o.b.c.
3. Grafen?
4. Néel 3 i MIT

## 11 Lokalizacja Andersona

### 11.1 Geneza problemu. Sytuacja w wymiarach 1 i 2 oraz 3

Wszystkie rozpatrywane przez nas do tej pory układy miały jedną wspólną cechę – były *periodyczne*. (Mam na myśli układy sieciowe).

Badaliśmy ich różne cechy, ale jedna z nich była wspólna: Była to *rozciągłość przestrzenna funkcji falowej*. Dokładniej, było to najłatwiej stwierdzić w przypadku periodycznych warunków brzegowych, ale podobną sytuację mamy też w przypadku np. warunków brzegowych otwartych. Dla warunków periodycznych, funkcjami własnymi są funkcje trygonometryczne o okresach od  $N$  do 1. Tak, jak je dotąd otrzymywaliśmy, to są to *pierwiastki z jedyńki*, więc trywiałem jest, że – od 1 do  $N$  – moduły wszystkich składowych dowolnego wektora własnego mają wartość 1.

Spróbujmy problem nieco 'zdetrywializować', pamiętając, że gdy mamy wektor własny, składający się z samych pierwiastków z jedyńki, dla układu z periodycznymi warunkami brzegowymi, to jest on liniową kombinacją fal biegnących w lewo i w prawo. Gdy weźmiemy taką liniową kombinację wektorów  $v_k \pm v_{N-k}$ , to otrzymamy czysto rzeczywiste wektory, o składowych składających się z samych cosinusów (bądź sinusów). Konkluzja jest taka sama – dowolna funkcja własna rozciąga się na cały układ. **RYS.**

Bardzo podobną sytuację mamy dla *otwartych* warunków brzegowych. Tu poprzestaniemy na ilustracji numerycznej **RYS.** dla kilku funkcji własnych.

**A TYMCZASEM!** Periodyczność jest *idealizacją*: w praktyce żadne układy w przyrodzie nie są dokładnie periodyczne. Czasem periodyczność wygląda na dobre przybliżenie – najczystsze substancje, jakie daje się otrzymać, mają ok.  $10^{-8}$  % zanieczyszczeń.

Warto więc sprawdzić, jak obecność zanieczyszczeń (psujących też periodyczność) odbija się na własnościach *funkcji własnych* elektronów w kryształach. Może to być wstęp do badania kolejnych własności zanieczyszczonych kryształów.

#### 11.1.1 Wtręt: Za jakie efekty odpowiedzialne są domieszki

Okazuje się, że czasem obecność zanieczyszczeń nie ma zasadniczego znaczenia, ale czasem ma. Jednymi z (bardzo ważnych) efektów, za obecność których odpowiedzialne są domieszki, są:

- nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe. Jeden z pierwszych związków, w którym je odkryto, to  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ ,  $x$  – stężenie domieszki (baru) – małe (rzędu 0.15). Nadprzewodnictwo istnieje w określonym zakresie stężeń  $x$  (ok. 0.1 – 0.3).
- Ułamkowy kwantowy efekt Halla. Kwantowy efekt Halla polega na kwantowaniu *oporności Halla* jako funkcji przyłożonego pola magnetycznego. Początkowo obserwowano, że oporność jest (w odpowiednich jednostkach) liczbą *całkowitą* (IQHE), później zaś okazało się, że może też być *ułamkowa* (FQHE). Do wyjaśnienia FQHE konieczne jest uwzględnienie obecności *nieporządku* w próbce.
- Wytrzymałość Wzmianka o wytrzymałości czystego NaCl;
- Własności transportu: Rozpraszanie i interferencja fal rozproszonych przez domieszki może mieć decydujący wpływ na np. przewodnictwo

Trudno problem potraktować elementarnie, a przynajmniej z tym stopniem prostoty, z jakim można było to zrobić przy badaniu układów periodycznych. – mimo że mamy model cząstek *nieoddziaływujących*.

### 11.1.2 Co zrobił Anderson

Pierwsze, pionierskie kroki w badaniu wpływu domieszek na własności funkcji falowych zrobił Anderson [13], już ponad pół wieku temu. Analizował on model tej klasy, którą zajmowaliśmy się w poprzedniej Section, a przykładowego Hama napiszemy za chwilę, w Subsec. 11.2. Jest to model sieciowy z potencjałem przypadkowo zmieniającym się od węzła do węzła. Anderson pokazał, że, w  $d = 1$ , przy niskich energiach, elektrony nie będą dyfundować: Jeśli początkowo funkcja falowa była gdzieś przestrzennie zlokalizowana, to (z dużym prawdopodobieństwem) będzie ona zlokalizowana dowolnie długo.

Zjawisko lokalizacji można rozpatrywać jako efekt wielokrotnych odbić na przypadkowo rozłożonych domieszkach. Okazuje się, że króluje interferencja destruktywna i funkcja wykładniczo 'gaśnie' wraz z odległością.

Dokładniejsze sformułowanie, oraz następne wyniki, jest następujące ??:

W modelu ciasnego wiązania, który rozważał Anderson, ewolucja funkcji falowe  $\psi$  na sieci  $d$ -wymiarowej sieci  $\mathbb{Z}^d$  opisana jest przez równanie Schrödingera:

$$i\hbar\dot{\psi}_t = H\psi_t,$$

gdzie hamiltonian  $H$  jest dany przez

$$(H\phi)(j) = E_j\phi(j) + \sum_{k \neq j} V(|k - j|)\phi(k),$$

tu  $E_j$  jest nieskorelowaną zmienną przypadkową, zaś oddziaływanie  $V(r)$  maleje z odległością jak  $r^{-2}$  dla dużych  $r$ . Jako przykład, można przyjąć, że  $E(j)$  ma jednorodny rozkład w  $[-W, W]$  oraz

$$V(|r|) = \begin{cases} 1, & |r| = 1 \\ 0, & \text{w innych przypadkach.} \end{cases}$$

Zakładając, że dla  $t = 0$ , funkcja  $\psi_0$  jest zlokalizowana wokół początku układu współrzędnych, interesujemy się, jak szybko dyfunduje rozkład prawdopodobieństwa  $|\psi_t|^2$ . Analiza Andersona pokazuje, że:

1. Jeśli  $d$  jest równy 1 lub 2 i dla dowolnego  $W$ , lub  $d = 3$  oraz  $W/\hbar$  jest dostatecznie duży, to dla dowolnego  $t$  funkcja falowa pozostaje zlokalizowana, tzn. zachodzi oszacowanie

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |\psi_t(n)|^2 |n| \leq C$$

jednostajnie w  $t$ . Zjawisko to zwane jest *lokalizacją Andersona*.

2. jeśli natomiast  $d \geq 3$  oraz  $W/\hbar$  jest mały, to

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |\psi_t(n)|^2 |n| \approx D\sqrt{t},$$

dla pewnej stałej  $D$ , zwanej *stałą dyfuzji*.



Lokalizacja Andersona była badana w różny sposób: numerycznie, teoretycznie (techniki jakie stosowano to np. SUPERSYMETRIA), doświadczalnie też. Dużo jest jednak dalej otwartych problemów, np. znalezienie oszacowań na stopień nieporządku w trzech wymiarach, powyżej którego następuje lokalizacja.

A wszystko to już na poziomie cząstek NIEODDZIAŁYWUJĄCYCH! Uwzględnienie oddziaływań to kolejny, o wiele mniej zbadany szczebel...

## 11.2 Numerki – jak zobaczyć lokalizację w $d = 1$

W tej Subsection zbadamy numerycznie prosty model sieciowy lokalizacji Andersona, i prosty problem – *lokalizację* funkcji falowych. Będzie to model z rodzaju tych, jakie badaliśmy w poprzedniej Section, tzn. cząstki w zewnętrznym potencjale:

$$H_{nn} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) + \lambda \sum_i U_i n_i, \quad (246)$$

gdzie tym razem  $U_i$  jest *zmienną przypadkową*, przyjmującą wartości dyskretne:  $U_i = \{-1, 0, 1\}$ , zaś  $\lambda$  jest parametrem charakteryzującym 'siłę' nieporządku.

Dla  $\lambda = 1$ , dla jakiegoś wylosowanego nieporządku, wyniki przedstawiono na **RYS.**.

Dla porównania, pokazujemy też odrobinę inny setup i wyniki z prezentacji Riery [12].

## 12 O modelu Hubbarda słów kilka

### 12.1 Model Hubbarda – ogólne przedstawienie

Na pytanie zawarte w tytule tego rozdziału można najkrócej odpowiedzieć: Jest to jeden z najprostszych sieciowych modeli silnie skorelowanych elektronów. Potrzeba jego wykorzystania pojawia się tam, gdzie zawodzi opis przy użyciu przybliżenia elektronów niezależnych. Przybliżenie to uwzględnia oddziaływanie elektronów w sposób samouzgodniony (analogicznie jak przybliżenie Hartree-Focka w fizyce atomowej lub cząsteczkowej). Do opisu wielu zjawisk taki model wystarcza. Istnieją jednak problemy, w których elektronów nie można traktować jako cząstek niezależnych – należy do nich np. spora klasa przejść metal-izolator lub zjawisko ferromagnetyzmu. Układy, do opisu których nie wystarcza model cząstek niezależnych są to tzw. układy *silnie skorelowanych* elektronów.

Model Hubbarda jest właśnie jednym z najprostszych sieciowych modeli silnie skorelowanych elektronów, a jednocześnie jednym z najważniejszych modeli w fizyce ciała stałego. Stwierdzenie takie nosi nieuchronne piętno subiektywizmu. Można jednak podać bardziej wymierne kryteria: jest to jeden z najczęściej badanych modeli. W archiwum elektronicznym *cond-mat* w ciągu ostatnich lat ukazuje się rocznie kilkadziesiąt prac mu poświęconych, zaś praca Hubbarda, w której autor ten model wprowadził, była do dziś (maj 2013) cytowana ponad 5000 razy.

Model został wprowadzony przez J. Hubbarda w r. 1963 [15]. Gwoli sprawiedliwości historycznej, niezależnie podobne modele sformułowali: Gutzwiller [16] i Kanamori [17]. Pierwotną motywacją wprowadzenia tegoż modelu był opis ferromagnetyzmu metalicznego (*“itinerant”*). Te wczesne próby nie zakończyły się powodzeniem – ówczesne dostępne metody analizy hamiltonianów takich jak (278) były mało skuteczne.

Później dostrzeżono, że model Hubbarda jest naturalnym ‘środowiskiem’ do badania innych zjawisk, takich jak:

- inne uporządkowania magnetyczne (antyferromagnetyzm, ferrimagnetyzm, metamagnetyzm ...)
- przejścia metal-izolator (Metal-Insulator Transition) [?]
- nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe [?]
- kondensacja Bosego-Einsteina zimnych atomów na ‘sieci optycznej’ [?] (tu cząstki – atomy w pułapce magnetycznej – nie są fermionami a bozonami).

Wierzy się, że w ramach modelu Hubbarda można wyjaśnić te zjawiska, że model Hubbarda jest najprostszym modelem, w ramach którego możemy stojąc za nimi fizykę zrozumieć bez “wkładania rękami” tych efektów w hamiltonian. (W wielu przypadkach nadzieje te już się potwierdziły). Rola modelu Hubbarda jest więc dla teorii silnie skorelowanych elektronów równie fundamentalna, jak modelu Isinga dla teorii przejść fazowych: Oba modele stanowią “archetypy”, “paradygmaty” dla odpowiednich dziedzin.

Model Hubbarda nie jest modelem fundamentalnym – przynajmniej w tym sensie, w jakim można uważać za fundamentalne np. równanie Schrödingera albo Diraca: Równania te *odgaduje się* albo *postuluje*, natomiast model Hubbarda się *wyprowadza*. Wyprowadzenie modelu Hubbarda z równania Schrödingera następuje przez szereg założeń, etapów pośrednich i przybliżeń, z których najważniejsze to: założenie o istnieniu periodycznej struktury

krystalicznej; przybliżenie ciasnego wiązania; pominięcie całego szeregu całek w przybliżeniu ciasnego wiązania.

Jak wspomnieliśmy, model Hubbarda jest jednym z *najprostszych* modeli opisujących układ oddziaływujących elektronów wędrownych (itinerant) w kryształach (modelowanym przez potencjał periodyczny). W hamiltonianie obecne jedynie dwa człony: operator energii kinetycznej, opisujący ruch cząstek swobodnych po sieci krystalicznej, oraz operator energii oddziaływania tych cząstek – mający chyba najprostszą możliwą postać: cząstki się odpychają, gdy znajdują się na jednym węźle, oraz nie oddziałują, gdy są na różnych węzłach. Taką postać oddziaływania można uważać za skrajnie uproszczony opis ekranowanego oddziaływania kulombowskiego.

Tu pokazać Hama; będzie on później z bardziej szczegółowymi objaśnieniami, więc szkoda przepisywać dwa razy to samo; ale pokazać można.

Tak otrzymany hamiltonian jest drastycznie zredukowany w porównaniu z rzeczywistością i w związku z tym na ogół nie oczekuje się, że model Hubbarda będzie dawał ilościowy opis faktów eksperymentalnych: przy wyprowadzaniu z równania Schrödingera czyni się zbyt wiele upraszczających założeń. Uzasadnione są jednak nadzieje, że badanie modelu Hubbarda przyniesie chociaż jakościowe zrozumienie wielu zjawisk z zakresu fizyki silnie skorelowanych elektronów.

Może słów parę o zasadzie uniwersalności

## 12.2 Opis układów wielu fermionów: Fermiony o spinie 0

### 12.2.1 Przestrzeń Hilberta dla układów jednocząstkowych

Dotąd analizowaliśmy hamiltoniany *jednocząstkowe*. Do ich analizy wystarczyła przestrzeń Hilberta stanów takiego układu, a była to przestrzeń  $N$ –wymiarowa, gdzie  $N$  było liczbą węzłów. Gdy mieliśmy tu  $M$  cząstek, to poprzestaliśmy na wzmiance, że stan układu jest antysymetryzowanym iloczynem  $M$  dowolnych różnych funkcji jednocząstkowych.

Teraz, chcąc jawnie uwzględnić oddziaływania, musimy najpierw dobrze zdefiniować przestrzeń Hilberta stanów takich układów.

Zacznijmy od przypomnienia definicji przestrzeni Hilberta stanów układu jednocząstkowego, gdzie mamy  $N$  węzłów. Niech  $\Lambda$  będzie zbiorem  $N$  węzłów. Każdą funkcję falową  $\varphi$  jednej cząstki na  $\Lambda$  możemy zapisać jako

$$\varphi = \{\varphi_i\} \equiv \varphi(i), \quad i \in \Lambda. \quad (247)$$

Składowe  $\varphi_i$  są na ogół zespolone:  $\varphi_i \in \mathbb{C}$ . Tak więc zbiór wszystkich funkcji falowych  $\phi$  tworzy przestrzeń wektorową  $\mathcal{H}^{(1)}$ :

$$\mathcal{H}^{(1)} \cong \mathbb{C}^N \cong l^2(\Lambda; \mathbb{C})$$

Naturalną bazą w takiej przestrzeni jest baza złożona z funkcji  $\chi_i$ ,  $i = 1 \dots N$ ; funkcja  $\chi_i$  to taka, że mamy cząstkę na  $i$ –tym węźle ('funkcja charakterystyczna  $i$ –tego węzła'). Inna baza to baza złożona z wektorów, których składowymi są kolejne potęgi pierwiastków  $N$ –tego stopnia z jedynki. Fizycznie są to *fale płaskie*.

Zgodnie z zasadą superpozycji można z funkcji  $\chi_i$  zbudować dowolną funkcję jednocząstkową, czyli zapisać (247) jako:

$$\varphi = \sum_{i=1}^N \varphi_i \chi_i$$

Gwoli formalności, iloczyn skalarny  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  w  $\mathcal{H}^{(1)}$  jest

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \bar{\varphi}_i \psi_i.$$

Dowolny operator jednocząstkowy  $A$  (mieliśmy do czynienia z hamiltonianem, ale analogicznie jest z innymi obserwabłami) to samosprężony operator  $A : \mathcal{H}^{(1)} \rightarrow \mathcal{H}^{(1)}$ .

Jako kanoniczny przykład takiego operatora jednocząstkowego można wziąć operator *przeskoku* (tzn. tunelowania elektronu pomiędzy węzłami). Dany jest on przez symetryczną rzeczywistą macierz  $T$ , o składowych  $[t_{ij}]$ . Sieciowe równanie Schrödingera dla elektronu na sieci ma więc postać:

$$\sum_j t_{ij} \psi_j^{(k)} = \epsilon^{(k)} \psi_i^{(k)}$$

– zapis we współrzędnych;  $i, j$  są to indeksy sieciowe, zaś  $k$  jest numerem energii własnej i funkcji własnej, tak więc  $\psi^{(k)} = \{\psi_j^{(k)}\}$ . Można też zapisać w postaci 'coordinate free'

$$T\psi^{(k)} = \epsilon^{(k)}\psi^{(k)}$$

Takich macierzy diagonalizowaliśmy już bardzo wiele.

### 12.2.2 Układy wielocząstkowe – opis przez iloczyny funkcji jednocząstkowych

To teraz wreszcie musimy przystąpić do opisu układów wielocząstkowych.

Rozpatrzmy najspierw układy dwucząstkowe.

Na pierwszy rzut oka, wydawałoby się, że skoro mamy dwie identyczne cząstki na tym samym obiekcie (grafie  $\Lambda$ ), to przestrzenią stanów układu dwucząstkowego powinien być iloczyn tensorowy  $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)}$ . Ale myśląc tak, przeoczamy pewien fakt, a mianowicie, że dla układu fermionów, funkcja falowa musi być *antysymetryczna*. Bardziej konkretnie: Mamy dwucząstkową funkcję falową  $\psi^{(2)} \equiv \psi(i_1, i_2)$  (załóżmy, że jesteśmy w opisie położeniowym, więc  $i_1$  jest położeniem pierwszej cząstki, a  $i_2$  drugiej). Taka dowolna funkcja falowa musi zmieniać znak przy zamianie argumentów:

$$\psi(i_1, i_2) = -\psi(i_2, i_1).$$

Przestrzenią stanów nie jest więc cała przestrzeń  $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)}$ , a jej podprzestrzeń, złożona z funkcji antisymetrycznych. Oznaczmy ją  $\mathcal{H}_A^{(2)}$ :

$$\mathcal{H}_A^{(2)} = \mathcal{A}(\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)}). \quad (248)$$

tu  $\mathcal{A}$  oznacza antisymetryzację.

Bazę w takiej przestrzeni tworzą (antisymetryczne) funkcje  $\chi_{ij}$ :

$$\chi_{ij}(1, 2) = \chi_i(1)\chi_j(2) - \chi_j(1)\chi_i(2) = \begin{vmatrix} \chi_i(1) & \chi_i(2) \\ \chi_j(1) & \chi_j(2) \end{vmatrix}, \quad 1 \leq i < j \leq N. \quad (249)$$

ostatnia postać to znany być może Czytelnikowi z kursu fizyki atomowej *wyznacznik Slatera*.

*Uwaga.* Widać że gdy w powyższej funkcji wstawić  $i = j$ , to automatycznie otrzyma się zero. Jest to odbicie *zakazu Pauliego*<sup>3</sup> mówiącego, iż w jednym stanie kwantowym może się znajdować co najwyżej jeden fermion.

<sup>3</sup>Nie mylić z *efektem Pauliego*; jeśli ktoś ze słuchaczy nie słyszał, to prowadzący chętnie tę anegdotę opowie

Z drugiej strony, Czytelnik, obznajomiony choć trochę z algebrą tensorową i/lub geometrią różniczkową, od razu rozpozna tutaj *przestrzeń 2-form*. Jest to przejaw tego, że te same struktury występują w wielu różnych miejscach...

Z postaci powyższej bazy, widać od razu, że

$$\dim \mathcal{H}_A^{(2)} = \binom{N}{2}.$$

Dowolną funkcję falową układu dwucząstkowego można przedstawić jako kombinację liniową:

$$\psi(1, 2) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} a_{ij} \chi_{ij}(1, 2).$$

Teraz jest jasne, jak będzie wyglądała konstrukcja przestrzeni stanów dla układu  $k$  fermionów ( $k \leq N$ ). Funkcja falowa musi być antysymetryczna względem przestawień dowolnych dwu spośród  $k$  cząstek. Bazę w przestrzeni  $\mathcal{H}_A^{(k)}$  takich funkcji:

$$\mathcal{H}_A^{(k)} = \mathcal{A}(\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(1)}) \quad (k \text{ razy}) \quad (250)$$

będą stanowić wyznaczniki złożone z  $k$  funkcji jednocząstkowych:

$$\chi_{i_1, i_2, \dots, i_k}(1, 2, \dots, k) = \begin{vmatrix} i_1(1) & i_1(2) & \dots & i_1(k) \\ i_2(1) & i_2(2) & \dots & i_2(k) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ i_k(1) & i_k(2) & \dots & i_k(k) \end{vmatrix}, \quad 1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N \quad (251)$$

Dowolna  $k$ -cząstkowa funkcja falowa ma postać

$$\psi(1, 2, \dots, k) = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N} a_{i_1 i_2 \dots i_k} \chi_{i_1, i_2, \dots, i_k}(1, 2, \dots, k),$$

zaś wymiar  $k$ -cząstkowej przestrzeni Hilberta wynosi

$$\dim \mathcal{H}_A^{(k)} = \binom{N}{k}.$$

Kto miał do czynienia z formami, to na pewno zobaczy, że  $\mathcal{H}_A^{(k)}$  to przestrzeń (algebraicznych)  $k$ -form na przestrzeni  $N$ -wymiarowej.

### 12.2.3 Układy wielocząstkowe – opis przez operatory kreacji i anihilacji

Czytelnik o inklinacjach purystycznych może odczuć niesmak przy czytaniu powyższej Subsubsection. Powód jest następujący: Pisząc  $k$ -cząstkową funkcję falową, *rozdzielaliśmy w zapisie cząstki* – pisaliśmy bowiem  $\psi(1, 2, \dots, k)$ . Tymczasem wiadomo, że fermiony (i bozony) są nierozróżnialne. Czy można tę nierozróżnialność zapewnić już na poziomie zapisu funkcji falowej?

Okazuje się, że tak, i zobaczymy teraz, w jaki sposób można to zrobić.

Zdefiniujemy mianowicie przestrzeń Hilberta dla problemów wielofermionowych, używając formalizmu *operatorów kreacji i anihilacji*. Z każdym węzłem sieci  $i \in \Lambda$  stwarzymy operator fermionowy  $a_i$ . Jak ze wszystkimi operatorami, dla każdego z tych operatorów można brać sprzężenia, można też brać ich kombinacje liniowe (ze współczynnikami, na ogół, zespolonymi), można wreszcie brać iloczyny, otrzymując w ten sposób inne operatory.

Żądamy, aby operatory  $a_i$  oraz ich sprzężenia  $a_i^\dagger$  (zwane *operatorami kreacji*) spełniały relacje *antykomutacji*:

$$\{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij}, \quad (252)$$

oraz

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 = \{a_i, a_j\} \quad (253)$$

dla wszystkich  $i, j \in \Lambda$ . Powyższe nawiasy klamrowe oznaczają *antykomutator*: Dla operatorów  $A, B$  definiujemy go jako

$$\{A, B\} = AB + BA$$

Zauważmy, że z (253) wynika, że  $(a_i)^2 = 0 = (a_i^\dagger)^2$  dla dowolnego  $i$ .

Interpretacja fizyczna operatorów  $a_i$  oraz  $a_i^\dagger$  jest następująca: Operatory  $a_i$  są operatorami *anihilacji* cząstki na węźle  $i$ , zaś  $a_i^\dagger$  są operatorami *kreacji*. Odpowiedni operator liczby cząstek to:

$$n_i = a_i^\dagger a_i.$$

Z własności (253) przekonujemy się, że operatory liczby cząstek na różnych węzłach *komutują*.

Ponadto  $n_i$  spełnia:

$$n_i^2 = a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i = a_i^\dagger (1 - a_i^\dagger a_i) a_i = a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i = a_i^\dagger a_i = n_i,$$

(wykorzystywaliśmy tu własności antykomutacji (252) i (253)), którą to równość możemy przepisać jako

$$n_i^2 - n_i = n_i(n_i - 1) = 0,$$

tak więc operator  $n_i$  ma dwie wartości własne: jeden oraz zero. Widzimy więc, że mamy spełniony *zakaz Pauliego*.

Używając tych operatorów, skonstruujemy teraz wieloelektronową przestrzeń Hilberta. Zaczniemy od pojedynczego *wektora próżni*  $\Phi_{\text{vac}}$ , który nie zawiera *żadnych* cząstek. Innymi słowy,  $\Phi_{\text{vac}}$  jest *anihilowany* przez dowolny operator *anihilacji*:

$$a_i \Phi_{\text{vac}} = 0 \quad \text{dla dowolnego } i \in \Lambda. \quad (254)$$

Zdefiniujmy teraz stan  $k$ -cząstkowy jako:

$$\Phi_{i_1, i_2, \dots, i_k} = a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger \dots a_{i_k}^\dagger \Phi_{\text{vac}}, \quad \text{gdzie } 1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N \quad (255)$$

Zwróćmy uwagę, że wszystkie węzły  $i_1, i_2, \dots, i_k$  muszą być *różne*, ponieważ gdyby któreś dwa byłyby takie same, to prawa strona równości (255) byłaby równa zero z uwagi na pierwszą równość (253).

Stan (255) interpretujemy jako odpowiadający cząstkom zlokalizowanym na węzłach  $i_1, i_2, \dots, i_k$ . Zwróćmy uwagę, że tu cząstek *nie numerujemy* – określamy jedynie ich ilość – więc ten sposób opisu zapewnia automatycznie nierozróżnialność cząstek. Natomiast antysymetria funkcji falowej przejawia się w inny sposób: Otóż operatory po prawej stronie (255) *antykomutują*. Przy zadanych  $i_1, i_2, \dots, i_k$  musimy więc utożsamić stany odpowiadające wszystkim możliwym ustawieniom operatorów kreacji (jest ich  $k!$ ) po prawej stronie równości w (255). Dany więc stan  $k$ -cząstkowy możemy więc zapisać na  $k!$  sposobów, odpowiadających wszystkim możliwym permutacjom operatorów kreacji.

Mamy więc np.

$$a_i^\dagger a_j^\dagger \Phi_{\text{vac}} = -a_j^\dagger a_i^\dagger \Phi_{\text{vac}}$$

Tak więc zapisujemy stan  $k$ -cząstkowy przez zadziałanie wszystkich możliwych  $k!$  ustawień operatorów kreacji na stan próżni.

Dalej, całą przestrzeń Hilberta stanów wszystkich możliwych stanów  $k$ -cząstkowych  $\mathcal{H}^{(k)}$  jest tworzona przez wszystkie  $k$ -elementowe podzbiory wszystkich  $N$  operatorów kreacji. Widać stąd, że

$$\dim \mathcal{H}^{(k)} = \binom{N}{k}$$

zgodnie z tym, co otrzymaliśmy uprzednio.

Na zakończenie tej Subsection poczyńmy jeszcze uwagę odnośnie natury rozważanych tu cząstek, tzn. fermionów bezspinowych. Mówienie o fermionach bezspinowych może więc wydawać się bez sensu, co – nieco tylko inaczej sformułowane – wywołuje jednoznaczne skojarzenia <sup>4</sup> w świetle związku spinu ze statystyką, zapodającym, że fermiony mają spin połówkowy, zaś spin zero jako żywo połówkowy nie jest. Ale rozważanie fermionów bezspinowych *jest* jednak z sensem. Mianowicie:

- Przy rozważaniu łańcuchów spinowych, w określonych przypadkach wykonuje się tzw. *transformację Jordana-Wignera*, po dokonaniu której zmienne spinowe przechodzą w bezspinowe operatory fermionowe.
- Dla fermionów ze spinem np.  $\frac{1}{2}$ , można rozważać podprzestrzeń zawierającą tylko cząstki o *jednakowym spinie* (np. 'w górę'). We wszystkich związkach antykomutacyjnych można wtedy pomijać spin i otrzymujemy dokładnie te związki antykomutacyjne co w tej Subsection, tzn. dla fermionów bezspinowych.

## 12.3 Układy wielu fermionów o spinie $\frac{1}{2}$

Dużo spośród rzeczy przedstawionych poniżej (aspekty matematyczne układów wielocząstkowych o spinie  $\frac{1}{2}$ , oraz dotyczących ferromagnetyzmu płaskodenego) są przytoczone za pracą [20].

### 12.3.1 Opis przez operatory kreacji i anihilacji

Zaprezentowane w poprzedniej Subsection rozważania dotyczące przestrzeni stanów i funkcji falowych układów wieloelektronowych były ważne, ale nie uwzględniały faktu, że elektron ma spin połówkowy i ten fakt jest odpowiedzialny za wiele efektów, które nie mogą być opisane w ramach modelu fermionów bezspinowych. ('Teoria powinna być tak prosta, jak to tylko możliwe – ale nie prostsza' (A. Einstein)). Poprzednia Subsection była jednak dobrą rozgrzewką, a ponadto w naturalny sposób można postępowanie stamtąd rozszerzyć na przypadek fermionów ze spinem.

Nie będziemy powtarzać konstrukcji z poprzedniej Subsection – wyglądają bardzo podobnie w obu przypadkach – ale wyszczególnimy różnice pomiędzy obydwoma przypadkami.

Podobnie pominiemy pierwszy sposób postępowania z Subsubsec. 12.2.2, a skupimy się na drugim sposobie z 12.2.3.

1. Spin każdej cząstki będziemy oznaczać dodatkowym indeksem, na ogół  $\sigma$ . Może przyjmować wartości  $\pm\frac{1}{2}$ ; będziemy te dwie sytuacje oznaczali:  $\uparrow$  lub  $\downarrow$ .

<sup>4</sup>Vide rysunek A. Mleczki z r. 1981: 'Obywatelu! Nie pieprz bez sensu'

2. Operatory kreacji i anihilacji cząstki o spinie  $\sigma$  na węźle  $i$  oznaczmy:  $c_{i,\sigma}^\dagger$  oraz  $c_{i,\sigma}$  odpowiednio.
3. Analogony relacji antykomutacji (252) oraz (253) są

$$\{c_{i,\sigma}^\dagger, c_{j,\eta}\} = \delta_{i,j}\delta_{\sigma,\eta} \quad (256)$$

oraz

$$\{c_{i,\sigma}^\dagger, c_{j,\eta}^\dagger\} = 0 = \{c_{i,\sigma}, c_{j,\eta}\} \quad (257)$$

dla dowolnych  $i, j \in \Lambda$  oraz dowolnych  $\sigma, \eta$ . Związki te implikują w szczególności, że

$$(c_{i,\sigma}^\dagger)^2 = 0, \quad (c_{i,\sigma})^2 = 0.$$

4. Operator liczby cząstek o spinie  $\sigma$  na węźle  $i$  to

$$n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}.$$

Operatory o *różnych* indeksach (zarówno spinowym, jak położeniowym) *komutują* ze sobą. Analogicznie jak poprzednio pokazujemy, że  $n_{i,\sigma}$  ma dwie wartości własne: 0 oraz 1. W odróżnieniu od cząstek bezspinowych, możemy tu zdefiniować operator *całkowitej* liczby cząstek na węźle  $i$  jako

$$n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}. \quad (258)$$

Tak więc przestrzeń stanów na jednym węźle jest czterowymiarowa, a bazę tej przestrzeni tworzą stany:  $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$ .

5. Próżnia  $\Phi_{\text{vac}}$  jest stanem bez jakichkolwiek cząstek, co jest reprezentowane jako

$$c_{i,\sigma}\Phi_{\text{vac}} = 0 \quad \text{dla dowolnych } i \in \Lambda, \sigma = \uparrow, \downarrow.$$

6. Dla dowolnego  $0 \leq k \leq 2N$ , (*Uwaga:* Uprzednio było:  $0 \leq k \leq N$ ) stan  $k$ -cząstkowy definiujemy jako

$$\Phi_{i_1,\sigma_1;i_2,\sigma_2;\dots;i_k,\sigma_k} = c_{i_1,\sigma_1}^\dagger c_{i_2,\sigma_2}^\dagger \dots c_{i_k,\sigma_k}^\dagger \Phi_{\text{vac}}. \quad (259)$$

Tutaj wymaganiem jest, aby wszystkie dwuindeksy  $\{i_l, \sigma_l\}$  były różne. Natomiast jeśli spotkają się dwa dwuindeksy o takich samych składowych położeniowych, to składowe spinowe muszą być różne.

7. Utożsamiamy wszystkie stany różniące się kolejnością operatorów kreacji w (259), pamiętając o znaku permutacji. Zasada Pauliego mówi tu to samo co uprzednio, że *w danym stanie kwantowym nie może przebywać naraz więcej niż jeden fermion*, tyle że stan jest tu określany przez położenie *oraz spin*.

**RYS.** – przykład elementu bazy układu wielocząstkowego, w którym występują wszystkie stany jednowęzłowe: pusty, 'up', 'down' i 'up-and-down'.



### 12.3.2 Przestrzeń Hilberta i jej struktura dla fermionów o spinie połówkowym a CrAnOp's

W poprzedniej Subsection wprowadziliśmy najspierw algebrę operatorów kreacji i anihilacji, a następnie zdefiniowaliśmy przestrzeń Hilberta przez działanie (reprezentacji tej) algebry na pojedynczy stan próżni. Znowu jednak, autor podejrzewa możliwość dyskomfortu estetycznego u co poniektórych Czytelników (i Czytelnic? Czytelniczek?) spowodowanego tym, że aby mówić o operatorach, należy najspierw wprowadzić przestrzeń, na której one działają. Tak więc wprowadzimy tu explicite przestrzeń Hilberta oraz działające w niej operatory.

Niech  $\tilde{\Lambda} = \Lambda \times \{\uparrow, \downarrow\}$  będzie przestrzenią konfiguracyjną pojedynczego elektronu. Będziemy oznaczali jej elementy jako  $u_i$ , tak więc  $\tilde{\Lambda} \ni u_i = \{i, \sigma_i\}$ , gdzie  $i \in \Lambda$ ,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . Przestrzeń Hilberta stanów pojedynczego elektronu  $\mathcal{H}^{(1)} = l^2(\tilde{\Lambda}; \mathbb{C})$ . Dla  $n = 0, 1, 2, \dots, 2N$  definiujemy  $n$ -cząstkowe przestrzenie Hilberta  $\mathcal{H}^{(n)}$  przez:

$$\mathcal{H}^{(0)} = \mathbb{C}, \quad (260)$$

$$\mathcal{H}^{(1)} = l^2(\tilde{\Lambda}; \mathbb{C}) \quad (261)$$

oraz

$$\mathcal{H}^{(n)} = \mathcal{P}_- \underbrace{l^2(\tilde{\Lambda}; \mathbb{C}) \otimes l^2(\tilde{\Lambda}; \mathbb{C}) \otimes \dots \otimes l^2(\tilde{\Lambda}; \mathbb{C})}_{n \text{ razy}} \quad (262)$$

gdzie  $\mathcal{P}_-$  jest operatorem rzutu na podprzestrzeń funkcji całkowicie antysymetrycznych, tzn. takich, że zmieniają znak, gdy się zamieni dowolne dwa ich argumenty. Explicite, mamy

$$\mathcal{P}_- \psi(u_1, u_2, \dots, u_n) = \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in S_n} (-1)^{\text{sgn}(\pi)} \psi(\pi(u_1), \pi(u_2), \dots, \pi(u_n)) \quad (263)$$

(zakładam, że Czytelnik wie, co to jest znak permutacji).

Teraz! Będziemy definiować operatory kreacji i anihilacji. Zaczniemy od operatora  $c_u$ .

Dla  $\psi \in \mathcal{H}^{(0)}$ , definiujemy

$$c_u \psi = 0 \quad \text{dla każdego } u.$$

Dla  $\psi \in \mathcal{H}^{(n)}$ , gdzie  $n \geq 1$ , definiujemy

$$(c_u \psi)(u_1, u_2, \dots, u_{n-1}) = \sqrt{n} \psi(u, u_1, u_2, \dots, u_{n-1}), \quad (264)$$

gdzie  $c_u \psi \in \mathcal{H}^{(n-1)}$ . Teraz operator sprzężony  $c_u^\dagger$ : Na przestrzeni  $\mathcal{H}^{(n)}$ , gdzie  $n \geq 1$ , operator  $c_u^\dagger$  działa następująco:

$$(c_u^\dagger \psi)(u_1, u_2, \dots, u_{n+1}) = \sqrt{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} (-1)^j \delta_{u, u_j} \psi(u_1, u_2, \dots, u_{j-1}, u_{j+1}, \dots, u_{n+1}), \quad (265)$$

tak więc  $c_u^\dagger \psi \in \mathcal{H}^{(n+1)}$ .

Dla  $\psi \in \mathcal{H}^{(2N)}$ , kładziemy

$$c_u^\dagger \psi = 0 \quad \text{dla każdego } u.$$

Naturalnie jest rozważać operatory  $c_u : \mathcal{H}^{(n)} \rightarrow \mathcal{H}^{(n-1)}$  oraz  $c_u^\dagger : \mathcal{H}^{(n)} \rightarrow \mathcal{H}^{(n+1)}$  jako działające na *przestrzeni Focka*

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{n=0}^{2N} \mathcal{H}^{(n)}. \quad (266)$$

Wreszcie, weźmy 1 jako stan bazowy przestrzeni  $\mathcal{H}^{(0)} = \mathbb{C}$  i utożsamijmy go z  $\Phi_{\text{vac}}$ . Wtedy, nietrudno sprawdzić, że stany (259) tworzą bazę w przestrzeni  $\mathcal{H}^{(Ne)}$ .

Zróbmy jakąś próbkę rachunków, aby zobaczyć, 'jak to działa'. Niech  $\Phi_{\text{vac}} = 1$  i obliczmy  $f = c_v^\dagger \Phi_{\text{vac}}$  oraz  $g = c_w^\dagger f = c_w^\dagger c_v^\dagger \Phi_{\text{vac}}$ . Z wzoru (265) mamy:

$$f(u_1) = (c_v^\dagger 1)(u_1) = \delta_{v,u_1}.$$

Dla  $g \equiv g(u_1, u_2)$  będziemy mieli:

$$\begin{aligned} g(u_1, u_2) &= (c_w^\dagger f)(u_1, u_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\delta_{w,u_1} f(u_2) - \delta_{w,u_2} f(u_1)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\delta_{w,u_1} \delta_{v,u_2} - \delta_{w,u_2} \delta_{v,u_1}). \end{aligned}$$

Zauważmy, że stan  $g$  jest antysymetryczny względem zamiany *nazw* dwu cząstek.

Ogólnie, dla stanu  $n$ -cząstkowego będziemy mieli

$$(c_{v_1}^\dagger c_{v_2}^\dagger \cdots c_{v_n}^\dagger \Phi_{\text{vac}})(u_1, u_2, \dots, u_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \delta_{v_1, u_1} & \delta_{v_2, u_1} & \cdots & \delta_{v_n, u_1} \\ \delta_{v_1, u_2} & \delta_{v_2, u_2} & \cdots & \delta_{v_n, u_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{v_1, u_n} & \delta_{v_2, u_n} & \cdots & \delta_{v_n, u_n} \end{vmatrix} \quad (267)$$

który to stan zwyczajowo zwany jest *wyznacznikiem Slatera*.

### 12.3.3 Notacja bez współrzędnych – rachunki na liniowych kombinacjach CrAnOp'ów

Notacja, którą omówimy poniżej, ułatwia trochę standardowe rachunki z udziałem operatorów kreacji i anihilacji.

Dla danego stanu jednoelektronowego  $\varphi = \{\varphi_i\}_{i \in \Lambda} \in \mathcal{H}^{(1)}$  zdefiniujmy

$$C_\sigma^\dagger(\varphi) = \sum_{i \in \Lambda} \phi_i c_{i,\sigma}^\dagger, \quad C_\sigma(\varphi) = \sum_{i \in \Lambda} \bar{\phi}_i c_{i,\sigma} \quad (268)$$

Szybki rachunek pokazuje, że spełniają one uogólnione relacje antykomutacji:

$$\{C_\sigma(\varphi), C_{\sigma'}^\dagger(\psi)\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \langle \varphi, \psi \rangle, \quad (269)$$

oraz

$$\{C_\sigma(\varphi), C_{\sigma'}(\psi)\} = 0 = \{C_\sigma^\dagger(\varphi), C_{\sigma'}^\dagger(\psi)\} \quad (270)$$

dla dowolnych  $\varphi, \psi \in \mathcal{H}^{(1)}$  oraz  $\sigma, \sigma' \in \{\uparrow, \downarrow\}$ .

Łatwo sprawdzić, że (270) implikuje:

$$(C_\sigma^\dagger(\varphi))^2 = 0 = (C_\sigma(\varphi))^2$$

dla dowolnych  $\varphi \in \mathcal{H}^{(1)}$  i dowolnego  $\sigma$ .

Mamy dalej następujący

**Lemat 1.** (Liniowa niezależność a iloczyny operatorów kreacji). Niech  $\{\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(n)}\}$  będą dowolnymi stanami z  $\mathcal{H}^{(1)}$ . Wtedy stan

$$C_\sigma^\dagger(\varphi^{(1)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(2)})\dots C_\sigma^\dagger(\varphi^{(n)})\Phi_{\text{vac}} \in \mathcal{H}^{(n)}, \quad (271)$$

zwany zwyczajowo *wyznacznikiem Slatera*, nie znika wtedy i tylko wtedy, gdy  $\{\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(n)}\}$  są liniowo niezależne.

**Dow.** Niech  $\mathcal{O}$  oznacza operator stojący z lewej strony (271), tzn.

$$\mathcal{O} = C_\sigma^\dagger(\varphi^{(1)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(2)})\dots C_\sigma^\dagger(\varphi^{(n)}).$$

Załóżmy, że powyższe  $n$  stanów  $\{\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(n)}\}$  jest liniowo zależnych. Wtedy możemy wyrazić jeden z nich jako liniową kombinację pozostałych, np:

$$\varphi^{(1)} = \sum_{j=2}^n \alpha_j \varphi^{(j)}$$

dla pewnych współczynników  $\alpha_j \in \mathbb{C}$ , i stąd mamy dla operatorów kreacji stowarzyszonych z tymi stanami:

$$C_\sigma^\dagger(\varphi^{(1)}) = \sum_{j=2}^n \alpha_j C_\sigma^\dagger(\varphi^{(j)}) \quad (272)$$

Tak więc iloczyn (271) znika, ponieważ po wstawieniu (272) do (271) w każdym składniku sumy pojawia się kwadrat jakiegoś operatora kreacji:  $(C_\sigma^\dagger(\varphi^{(j)}))^2$ , a on jest równy zeru.

Przyjmijmy więc teraz, że powyższe  $n$  stanów jest liniowo niezależnych, i pokażemy, że  $\mathcal{O}\Phi_{\text{vac}}$  nie znika. Policzmy kwadrat normy tego stanu:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{O}\Phi_{\text{vac}}\|^2 &= \langle \Phi_{\text{vac}}, \mathcal{O}^\dagger \mathcal{O} \Phi_{\text{vac}} \rangle \\ &= \langle \Phi_{\text{vac}}, C_\sigma(\varphi^{(n)})C_\sigma(\varphi^{(n-1)})\dots C_\sigma(\varphi^{(1)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(1)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(2)})\dots C_\sigma^\dagger(\varphi^{(n)})\Phi_{\text{vac}} \rangle \\ &= \sum_{\pi \in S_n} (-1)^{\text{sgn}(\pi)} (\langle \varphi^{(1)}, \varphi^{(\pi(1))} \rangle - C_\sigma^\dagger(\varphi^{(\pi(1))})C_\sigma(\varphi^{(1)})) \dots (\langle \varphi^{(n)}, \varphi^{(\pi(n))} \rangle - C_\sigma^\dagger(\varphi^{(\pi(n))})C_\sigma(\varphi^{(n)})) \\ &= \sum_{\pi \in S_n} (-1)^{\text{sgn}(\pi)} \langle \varphi^{(1)}, \varphi^{(\pi(1))} \rangle \dots \langle \varphi^{(n)}, \varphi^{(\pi(n))} \rangle \end{aligned} \quad (273)$$

gdzie  $S_n$  oznacza grupę permutacji zbioru  $n$ -elementowego, mamy więc

$$\pi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & k & \dots & n \\ \pi(1) & \pi(2) & \dots & \pi(k) & \dots & \pi(n) \end{pmatrix}$$

i we wzorze (273) mamy sumowanie po wszystkich  $n!$  permutacjach z  $S_n$ ;  $\text{sgn}(\pi)$  oznacza parzystość permutacji  $\pi$ .

Skąd się bierze obecność wszystkich uporządkowań i grupy permutacji? Otóż przypomnijmy sobie, że do generacji stanu wchodzi wszystkie możliwe uporządkowania operatorów kreacji działających na próżnię.

Przy przejściu zaś od drugiej do trzeciej linijki, przierzucamy wszystkie operatory anihilacji z lewa na prawo, korzystając za każdym przerezutem z reguł antykomutacji (269) i (273). Pamiętajmy dalej, że dowolny operator anihilacji w działaniu na próżnię daje zero. Pozostaną więc po wszystkich zadziałaniach na próżnię jedynie iloczyny skalarne, tzn. te wyrazy co są po prawej stronie (273).

Bo: Przyjrzyjmy się, jak to działa dla  $n = 1$ . Mamy:

$$C_\sigma(\varphi^{(k)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(l)}) = \langle \varphi^{(k)}, \varphi^{(l)} \rangle - C_\sigma^\dagger(\varphi^{(l)})C_\sigma(\varphi^{(k)})$$

co, w zadziałaniu na próżnię, da sam iloczyn skalarny  $\langle \varphi^{(k)}, \varphi^{(l)} \rangle$ .

A teraz dla  $n = 2$ . Mamy:

$$\begin{aligned} C_\sigma(\varphi^{(k)})C_\sigma(\varphi^{(l)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(m)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(n)}) &= C_\sigma(\varphi^{(k)})(\langle \varphi^{(l)}, \varphi^{(m)} \rangle - C_\sigma^\dagger(\varphi^{(m)})C_\sigma(\varphi^{(l)}))C_\sigma^\dagger(\varphi^{(n)}) \\ &= (\langle \varphi^{(l)}, \varphi^{(m)} \rangle - C_\sigma^\dagger(\varphi^{(m)})C_\sigma(\varphi^{(l)}))C_\sigma(\varphi^{(k)})C_\sigma^\dagger(\varphi^{(n)}) \\ &(\langle \varphi^{(l)}, \varphi^{(m)} \rangle - C_\sigma^\dagger(\varphi^{(m)})C_\sigma(\varphi^{(l)}))(\langle \varphi^{(k)}, \varphi^{(n)} \rangle - C_\sigma^\dagger(\varphi^{(n)})C_\sigma(\varphi^{(k)})) \end{aligned}$$

Po zadziałaniu na stan próżni zostaną znów same człony z iloczynami skalarnymi.

Teraz! W prawej stronie (273) rozpoznajemy wyznacznik macierzy  $G$ , utworzonej z iloczynów skalarnych wektorów  $\varphi^{(k)}$ , tzn. element  $G_{jk}$  tej macierzy jest:

$$G_{jk} = \langle \varphi^{(j)}, \varphi^{(k)} \rangle$$

a jest to – jak może Czytelnik pamiętać z algebry – *macierz Grama* iloczynów skalarnych. No i jeśli przypomnieć sobie, że wyznacznik macierzy Grama układu wektorów  $\{\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(n)}\}$  jest niezerowy wtedy i tylko wtedy, gdy wektory te są liniowo niezależne, to mamy już koniec dowodu lematu 1.

#### CBDO

Niech  $N_e$  będzie (dla większej komunikatywności) liczbą cząstek w układzie; oczywiście  $0 \leq N_e \leq N$ .

Następujący Lemat 2 jest prosty, ale bardzo ważny, bo daje alternatywny do opisanego niedawno w Subsecs. 12.2.3 i 12.3.1 sposób generowania przestrzeni stanów wielocząstkowych.

**Lemat 2. (Ogólna baza dla  $\mathcal{H}^{(N_e)}$ ).** Niech  $\{\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(N)}\}$  będą dowolnymi liniowo niezależnymi stanami w  $\mathcal{H}^{(1)}$ ; nie zakładamy ortonormalności tych stanów. (*Uwaga:* Jest tyle stanów ile węzłów). Wtedy stany:

$$\Gamma_{S_\uparrow, S_\downarrow} = \left( \prod_{j \in S_\uparrow} C_\uparrow^\dagger(\varphi^{(j)}) \right) \left( \prod_{j \in S_\downarrow} C_\downarrow^\dagger(\varphi^{(j)}) \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (274)$$

gdzie  $S_\uparrow, S_\downarrow$  są dowolnymi podzbiorami  $\{1, 2, \dots, N\}$  takie, że  $|S_\uparrow| + |S_\downarrow| = N_e$ , rozpinają przestrzeń  $\mathcal{H}^{(N_e)}$ .

**Dow.** Mamy  $N$  wektorów  $\{\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots, \varphi^{(N)}\}$  liniowo niezależnych, tworzą więc one bazę. Wyraźmy je poprzez wektory bazy standardowej  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_N\}$ :

$$\varphi^{(k)} = \sum_{j=1}^N \varphi_j^{(k)} \mathbf{e}_j, \quad k = 1, \dots, N.$$

A teraz wyrażmy bazę  $\mathbf{e}$  przez  $\varphi$ : Istnieje taka macierz  $A = [a_{ij}]$ , że

$$\mathbf{e}_j = \sum_{k=1}^N a_{jk} \varphi^{(k)},$$

lub – wypisując w składowych –

$$\delta_{j,l} = \sum_{k=1}^N a_{jk} \varphi_l^{(k)}.$$

Przypominając sobie definicję operatorów  $C_\sigma^\dagger(\varphi^{(j)})$ , możemy napisać

$$c_{j,\sigma}^\dagger = \sum_{k=1}^N a_{jk} C_\sigma^\dagger(\varphi^{(k)})$$

a w konsekwencji, dowolny stan bazowy (259) może być zapisany poprzez (274) .

**CBDO**

Niech teraz  $A = [a_{ij}]$ ,  $i, j \in \Lambda$  będzie macierzą. Użyjmy jej do zdefiniowania formy biliniowej operatorów fermionowych:

$$B(A) = \sum_{i,j \in \Lambda; \sigma = \uparrow, \downarrow} c_{i,\sigma}^\dagger a_{ij} c_{j,\sigma} \quad (275)$$

która to postać jest czasem (często?) nazywana drugą kwantyzacją  $A$ . Łatwo sprawdzić następującą relację komutacji (**z.d.**):

$$[B(A), C_\sigma^\dagger(\varphi)] = C_\sigma^\dagger(A\varphi) \quad (276)$$

(przypomnijmy, że  $[\cdot, \cdot]$  jest *komutatorem*, tzn.  $[X, Y] = XY - YX$ ).

Zachodzi także relacja komutacji dla dwu form biliniowych, odpowiadających macierzom  $A_1, A_2$  (**z.d.**):

$$[B(A_1), B(A_2)] = B([A_1, A_2]) \quad (277)$$

Obie niezadługo się nam przydadzą.

## 12.4 Hamiltonian modelu Hubbarda

### 12.4.1 Sam Ham

Hamiltonian modelu Hubbarda zawiera dwa wyrazy:

$$H_\Lambda = T_\Lambda + V_\Lambda, \quad (278)$$

gdzie:

$$T_\Lambda = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) \quad (279)$$

$$V_\Lambda = U \sum_{i \in \Lambda} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (280)$$

Oznaczenia powyżej:  $c_{i,\sigma}^\dagger, c_{i,\sigma}$  – operatory kreacji i anihilacji dla fermionów o spinie  $\sigma$  na węźle  $i$ , zaś  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$  jest operatorem liczby cząstek.

Tu ponowny komentarz nt. interpretacji powyższych członów. Był on już uprzednio, więc tylko do ustnego powtórzenia.

### 12.4.2 Uzasadnienie – filozofia modelu ciasnego wiązania

Rozpatrzmy na początku *sieć krystaliczną*, składającą się z identycznych *atomów*. (Podobnie można rozpatrywać sieć krystaliczną złożoną z kilku rodzajów atomów) Opis takiego układu to rozwiązanie równania Schrödingera dla oddziaływujących elektronów w potencjale periodycznym. Tak postawione, zadanie jest beznadziejnie trudne.

Stawiamy więc skromniejsze cele i spróbujmy skonstruować jakieś rozsądne przybliżenie, które dawałoby własności układu w zakresie małych energii. W tym celu, rozpatrzmy

najsamprzód funkcję falową pojedynczego atomu. Nazwijmy zlokalizowane funkcje własne izolowanego atomu *orbitalami*. (W fizyce atomowej mamy orbitale wywodzące się z atomu wodoru, nazywane: s,p,d,f,...). Pomijamy tu całe *widmo ciągłe*.

Zakładamy teraz, że funkcję falową *całego* kryształu można przedstawić jako *liniową kombinację orbitali atomowych*. (Zostawiamy tu na boku problem zupełności takiego rozwinięcia oraz szybkości zbieżności).

Teraz: Skoro dowolny stan możemy wyrazić w języku operatorów kreacji, to nic dziwnego, że dowolny operator można wyrazić poprzez operatory kreacji i anihilacji. (jest to tzw. formalizm *drugiego kwantowania*).

Ogólna postać hamiltonianu elektronowego  $\hat{H}$ , zawierającego oddziaływania jedno- i dwuciałowe, jest w formalizmie drugiej kwantyzacji następująca:

$$\hat{H} = \sum_{ij;\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \sum_{ijkl;\sigma,\sigma'} \langle ij | \frac{1}{r} | kl \rangle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma} \quad (281)$$

gdzie  $c_{i,\sigma}^\dagger$  ( $c_{i,\sigma}$ ) jest operatorem kreacji (anihilacji) elektronu o spinie  $\sigma$  na orbitalu Wanniera zlokalizowanym na węźle  $i$  [?];  $T_{ij}$  jest całką nakładania pomiędzy orbitalami i można ją interpretować jako macierz stałych przeskoku ("*hoppingu*") elektronu pomiędzy węzłami  $i$  oraz  $j$ , zaś  $\langle ij | \frac{1}{r} | kl \rangle$  jest elementem macierzowym oddziaływania kulombowskiego w bazie funkcji Wanniera na węzłach:  $i, j, k, l$ . Najistotniejsze elementy macierzowe to:

$$U \equiv \langle ii | \frac{1}{r} | ii \rangle, \quad (282)$$

$$V \equiv \langle ij | \frac{1}{r} | ij \rangle, \quad i, j \text{ są najbliższymi sąsiadami} \quad (283)$$

$$X \equiv \langle ii | \frac{1}{r} | ij \rangle, \quad i, j \text{ są najbliższymi sąsiadami} \quad (284)$$

Wielkości te są zwykle nazywane następująco:  $U$  – oddziaływanie kulombowskie na węźle (*on-site interaction*);  $V$  – oddziaływanie kulombowskie pomiędzy najbliższymi sąsiadami (*nearest-neighbour density interaction*);  $X$  – skorelowany hopping (*correlated hopping* lub *bond-charge interaction*).

### **Założenia nt. jednopasmowego modelu Hubbarda:**

1. Zakładamy, że na każdym atomie mamy tylko *jeden* orbital. *Uwaga:* Można też rozpatrywać więcej rodzajów orbitali na węźle. Takie modele przedstawimy trochę później – są to tzn. modele multiorbitalowe, lub periodyczny model Andersona.
2. Zaniedbujemy wszystkie elementy macierzowe oddziaływania kulombowskiego, oprócz  $U = \langle ii | \frac{1}{r} | ii \rangle$ .
3. Zakładamy, że przeskoczenie elektronów ma miejsce tylko między najbliższymi sąsiadami. *Uwaga (do 2 i 3):* Pozostając w ramach modelu z jednym orbitalem na węźle, można uwzględnić inne człony, takie jak (283), (284), czy też przeskoki między dalszymi sąsiadami, otrzymując w ten sposób różne rozszerzenia najprostszej wersji modelu Hubbarda.

Przy tych założeniach otrzymujemy hamiltonian (278).

### 12.4.3 Diagonalizacja czystego członu kinetycznego

Zobaczymy, jak będzie, w formalizmie wielocząstkowym, wyglądała diagonalizacja operatora hoppingu (czyli sieciowej energii kinetycznej). Mamy więc macierz  $T = [t_{ij}]$  stałych przeskoku (hoppingu). Daje to Hama:

$$H_{\text{hop}} = B(T) = \sum_{ij;\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \quad (285)$$

Uprzednio zdiagonalizowaliśmy już problem jednoelektronowy (wiele razy w różnych wersjach). Gdy mamy rozwiązanie problemu jednoelektronowego, to nietrudno jest je rozszerzyć na przypadek wieloelektronowy. Niech  $\psi^{(j)}$  będzie wektorem własnym macierzy  $T$  o energii  $\varepsilon_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ . Zdefiniujmy nowy operator fermionowy  $a_{j,\sigma}^\dagger$  jako

$$a_{j,\sigma}^\dagger = C_\sigma^\dagger(\psi^{(j)}) \quad (286)$$

dla  $j = 1, 2, \dots, N$  oraz  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . Niech  $S_\uparrow, S_\downarrow$  będą dowolnymi podzbiórmi  $\{1, 2, \dots, N\}$  takie, że  $|S_\uparrow| + |S_\downarrow| = N_e$ . Zdefiniujmy

$$\Psi_{S_\uparrow, S_\downarrow} = \left( \prod_{j \in S_\uparrow} a_{j,\uparrow}^\dagger \right) \left( \prod_{j \in S_\downarrow} a_{j,\downarrow}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (287)$$

Lemat 2 pokazuje, że te stany tworzą bazę przestrzeni  $\mathcal{H}^{(N_e)}$ . Zauważmy teraz, że z pokazanych dopiero co relacji komutacji (276) oraz z równania na wartości własne w przypadku jednocząstkowym (REFxxx) mamy:

$$[H_{\text{hop}}, a_{j,\sigma}^\dagger] = [B(T), C_\sigma^\dagger(\psi^{(j)})] = B(C_\sigma^\dagger(\psi^{(j)})) = \varepsilon_j a_{j,\sigma}^\dagger;$$

a ponieważ mamy też  $H_{\text{hop}} \Phi_{\text{vac}} = 0$ , (bo w członie hoppingowym po prawej stronie stoją operatory anihilacji, które dają zero w wyniku działania na próżnię) to ostatecznie mamy

$$H_{\text{hop}} \Psi_{S_\uparrow, S_\downarrow} = \left( \sum_{j \in S_\uparrow} \varepsilon_j + \sum_{j \in S_\downarrow} \varepsilon_j \right) \Psi_{S_\uparrow, S_\downarrow} \quad (288)$$

Zdiagonalizowaliśmy więc Hama hoppingowego w sytuacji, gdy mamy *dowolną* liczbę cząstek (a dokładniej, sprowadziliśmy ten problem do problemu jednocząstkowego).

Podróżmy jeszcze nieco temat i zapytajmy, jaki będzie stan *podstawowy*, gdy mamy  $N_e$  cząstek w układzie. Widać, że minimalizacja odbywa się to przez wybór podzbiórów  $S_\uparrow, S_\downarrow$  tak, aby suma

$$\sum_{j \in S_\uparrow} \varepsilon_j + \sum_{j \in S_\downarrow} \varepsilon_j$$

osiągnęła najmniejszą możliwą wartość. Bardziej explicite opis uzyskamy w typowej sytuacji, gdy widmo jednocząstkowe jest *niezdegenerowane*, tzn. ciąg  $\{\varepsilon_j\}$  jest ściśle rosnący, oraz jeśli liczba elektronów  $N_e$  jest parzysta. Wtedy stan podstawowy jest *niezdegenerowany* i można go zapisać jako

$$\Psi_{\text{GS}} = \left( \prod_{j=1}^{N_e/2} a_{j,\uparrow}^\dagger a_{j,\downarrow}^\dagger \Phi_{\text{vac}} \right). \quad (289)$$

Można energię stanu podstawowego zilustrować w ten sposób, że kolejno wypełniamy poziomy energetyczne stanów jednocząstkowych, poczynając od najniższego, i każdy z

nich wypełniamy elektronem ze spinem 'w górę' oraz ze spinem 'w dół'. Było to zapewne przedstawiane na którymś kursie Fizyki. Niezależnie podobne zjawisko było wielokrotnie obserwowane przy okazji zapisów na egzamin ustny z Matematyki<sup>5</sup>.

Zakończymy tę Subsubsection przez przypomnienie (sobie), jak wyglądały funkcje własne w przypadku jednoelektronowym. Były to mianowicie *fale płaskie* (dla układu translacyjnie niezmienniczego! Gdy była przypadkowość to już było inaczej). Tak więc dla modelu Hubbarda bez oddziaływania, z translacyjną niezmienniczością, mamy tę samą sytuację – funkcje własne są *falami płaskimi* (lub są iloczynami tychże).

Widać też, że w stanie podstawowym nie ma żadnych tendencji do uporządkowań magnetycznych – spin stanu podstawowego jest równy zeru.

#### 12.4.4 Diagonalizacja czystego członu potencjalnego

Rozwiążmy teraz zagadnienie na wartości własne z hamiltonianem (280), tzn.

$$V_{\Lambda}\Psi \equiv U \sum_{i \in \Lambda} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \Psi = E\Psi.$$

Tu zauważmy, że w przedstawieniu położeniowym, *hamiltonian  $V$  jest już w postaci diagonalnej!* A wartości własne są równe ilości węzłów podwójnie obsadzonych.

Bardziej formalnie, zapiszmy jakąś funkcję bazową w przedstawieniu położeniowym następująco. Niech  $L_{\downarrow}$ ,  $L_{\uparrow}$  będą dowolnymi podzbiorami  $\Lambda$  takimi, że  $|L_{\downarrow}| + |L_{\uparrow}| = N_e$  ( $N_e$  – całkowita liczba elektronów), i zdefiniujmy

$$\Psi_{L_{\downarrow}, L_{\uparrow}} = \left( \prod_{i \in L_{\downarrow}} c_{i,\downarrow}^{\dagger} \right) \left( \prod_{i \in L_{\uparrow}} c_{i,\uparrow}^{\dagger} \right) \Phi_{\text{vac}}. \quad (290)$$

Korzystając z własności *antykomutacyjnych* dla operatorów kreacji i anihilacji, pokazujemy następującą własność *komutacji*:

$$[n_{i,\sigma} c_{i',\sigma'}^{\dagger}] = \delta_{i,i'} \delta_{\sigma,\sigma'} c_{i,\sigma}^{\dagger},$$

skąd łatwo zobaczyć, że

$$V_{\Lambda} \Psi_{L_{\downarrow}, L_{\uparrow}} = U |L_{\downarrow} \cap L_{\uparrow}| \Psi_{L_{\downarrow}, L_{\uparrow}}$$

Dla danej liczby elektronów  $N_e$ , stan podstawowy konstruujemy tak, aby zminimalizować wartość  $|L_{\downarrow} \cap L_{\uparrow}|$ . Widać, że gdy  $N_e \leq |\Lambda|$ , zawsze można wybrać zbiory  $L_{\downarrow}$ ,  $L_{\uparrow}$  tak, aby  $L_{\downarrow} \cap L_{\uparrow} = \emptyset$ , i energia stanu podstawowego jest równa zeru. Wybór zbiorów  $L_{\downarrow}$ ,  $L_{\uparrow}$  zazwyczaj jest mocno niejednoznaczny, tak że stan podstawowy (wzbudzone zresztą też) są wysoce zdegenerowane.

Widzimy tutaj, że hamiltonian oddziaływania w modelu Hubbarda wykazuje tendencje do *lokalizacji* cząstek – w tym sensie, że funkcjami własnymi cząstek są funkcje bazowe w przedstawieniu położeniowym, tzn. z cząstkami zlokalizowanymi na węzłach.

Widać też, że nie ma tu żadnych tendencji do magnesowania – w stanie podstawowym są i magnetyczne, i niemagnetyczne konfiguracje. (Niedługo powiemy coś więcej o momencie pędu i magnetyzmie; ale na intuicyjnym poziomie możemy kojarzyć magnetyzm z różnicą elektronów ze spinem 'w górę' i ze spinem 'w dół'; a tu energia stanu podstawowego zupełnie od tego nie zależy).

<sup>5</sup>Bardziej szczegółowy komentarz ustny na wykładzie



### 12.4.5 Co się dzieje, gdy oba człony są razem...

Sprawdziliśmy wyżej dwie składowe hamiltonianu modelu Hubbarda, tzn.  $H_{\text{hop}} \equiv T$  oraz oddziaływania  $H_{\text{int}} \equiv V$ . Były one nietrudne do analizy. Przekonał się też, że żadne z tych oddziaływań nie faworyzuje uporządkowań magnetycznych.

Przekonał się także o przeciwstawnych tendencjach do lokalizacji obu tych członów z osobna:  $H_{\text{hop}}$  wykazywał tendencje do *delokalizacji* (stany własne typu fala), a  $H_{\text{int}}$  wykazywał tendencje do *lokalizacji* (stany własne typu cząstki).

Zapytajmy teraz: Jakie właściwości będzie wykazywał hamiltonian Hubbarda, będący sumą obu tych członów?

W świetle faktu, iż oba człony wykazują przeciwne tendencje (lokalizacja/delokalizacja), trudno oczekiwać prostej odpowiedzi na to pytanie. W przeciwstawnej tendencji obu członów można dopatrywać się analogii z dualizmem cząstka/fala [20]. Jest to dyskusyjne; ale trudności w analizie hamiltonianu Hubbarda się przez to nie zmniejszają.

Z technicznego punktu widzenia, trudności w analizie hamiltonianu Hubbarda wynikają z faktu, iż obie składowe  $H_{\text{hop}}$  i  $H_{\text{int}}$  *nie komutują* (**z.d.** – **sprawdzić**). Suma dwóch 'łatwych', ale niekomutujących operatorów nie musi być 'łatwym' obiektem badań.

Okazuje się, że model Hubbarda jest mocno niełatwy. Cecha ta sama w sobie nie znaczy jeszcze, że jest on interesujący. Okazuje się jednak, że w ramach tego modelu pojawia się duża różnorodność zjawisk, obecnych w realnych układach. Są to m.in.:

1. ferromagnetyzm;
2. antyferromagnetyzm;
3. ferrimagnetyzm;
4. przejście metal-izolator (układ jest przewodnikiem, gdy przeważa zachowanie falowe, a izolatorem, gdy przeważa tendencja do lokalizacji);
5. nadprzewodnictwo

Obecność niektórych z powyższych cech została udowodniona (w określonych modelach: FM; FI), inne (reszta) mają charakter gorzej lub lepiej udokumentowanych hipotez. **z.d.:** Udowodnić je, oraz udowodnić FM oraz FI w bardziej realistycznych sytuacjach. Stopień celujący – za każde z tych zadań – gwarantowany!

Wierzmy, że udowodnienie ich dla modelu Hubbarda będzie miało duże znaczenie dla zrozumienia tych zjawisk w realnych układach. ? Wzmianka o zasadzie uniwersalności, i podobieństwa, jakie jest ze stosowaniem modelu Isinga do magnetyków?

Poniżej rozpatrzmy bardzo wstępną analizę dwóch z powyższych problemów (AF dla układów na sieciach dwudzielnych przy half-filling) oraz – przy innych parametrach – tendencje do uporządkowania ferromagnetycznego.

## 12.5 Magnetyzm w modelu Hubbarda

### 12.5.1 Jeden elektron: Jak z operatorów kreacji i anihilacji zrobić operator spinu

Wałowaliśmy dotąd intensywnie operatory kreacji i anihilacji. Pojawia się jednak naturalne pytanie, co z całą resztą? Np. jak z modelu Hubbarda uzyskać fizyczne informacje np. o ciepłe właściwym czy podatności magnetycznej, albo o uporządkowaniu magnetycznym?

Jeśli chcemy opisywać układ w skończonej temperaturze, to nieuniknione jest wprowadzenie formalizmu *kwantowej mechaniki statystycznej*. Zajmiemy się natomiast problemem magnetyzmu w *stanach podstawowych* układu.

Przy opisie magnetyzmu podstawową rolę grają operatory *momentu pędu*. Tymczasem jak dotąd mieliśmy do czynienia tylko z operatorami kreacji i anihilacji. Jak z nich zbudować operatory spinowe?

Okazuje się, że można to zrobić biorąc stosowne formy biliniowe operatorów kreacji i anihilacji. Zanim to zrobimy, przypomnijmy sobie wszelako, grające podstawową rolę przy opisie cząstek o spinie połówkowym, *macierze Pauliego*  $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ :

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (291)$$

Macierze  $\sigma$  spełniają następujące związki komutacyjne:

$$[\sigma^\alpha, \sigma^\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma^\gamma$$

( $\alpha, \beta, \gamma$  przyjmują wartości  $x, y, z$ , zaś  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  to symbol zupełnie antysymetryczny). Macierze Pauliego pojawiają się w naturalny sposób przy opisie momentu pędu równego  $1/2$ :

$$\hat{s}^\alpha = \frac{1}{2}\hbar\sigma^\alpha,$$

dając w ten sposób związki komutacyjne dla składowych momentu pędu:

$$[\hat{s}^\alpha, \hat{s}^\beta] = \frac{1}{2}i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{s}^\gamma$$

Dalej będziemy używać takich jednostek, w których  $\hbar = 1$ .

Ponumerujemy teraz składowe spinu, a także przejdziemy od strzałek w górę i w dół do znaków plus i minus. Niech więc:

$$\uparrow \equiv + \equiv 1, \quad \downarrow \equiv - \equiv 2.$$

Zdefiniujmy teraz następujące biliniowe kombinacje operatorów kreacji i anihilacji:

$$\Sigma^\alpha = \frac{1}{2} \sum_{a,b=1,2}^2 c_a^\dagger \sigma_{ab}^\alpha c_b \quad (292)$$

Jawnie więc mamy:

$$\Sigma^x = \frac{1}{2}(c_+^\dagger c_- + c_-^\dagger c_+), \quad \Sigma^y = \frac{1}{2}i(-c_+^\dagger c_- + c_-^\dagger c_+), \quad \Sigma^z = \frac{1}{2}(c_+^\dagger c_+ - c_-^\dagger c_-) = \frac{1}{2}(n_+ - n_-). \quad (293)$$

Okazuje się, że operatory  $\Sigma^\alpha$  mają te same własności komutacyjne co operatory  $\hat{s}^\alpha$  składowych spinu  $1/2$ !

Weźmy bowiem np.  $[\Sigma^x, \Sigma^y]$ :

$$[\Sigma^x, \Sigma^y] = \frac{1}{4}i \left( \underbrace{-c_+^\dagger c_- c_+^\dagger c_-}_0 + \underbrace{c_+^\dagger c_- c_-^\dagger c_+}_{n_+(1-n_-)} - \underbrace{c_-^\dagger c_+ c_+^\dagger c_-}_{n_-(1-n_+)} + \underbrace{c_-^\dagger c_+ c_-^\dagger c_+}_0 \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \underbrace{c_+^\dagger c_- c_+^\dagger c_-}_0 + \underbrace{c_+^\dagger c_- c_+^\dagger c_+}_{n_+(1-n_-)} - \underbrace{c_-^\dagger c_+ c_+^\dagger c_-}_{n_-(1-n_+)} - \underbrace{c_-^\dagger c_+ c_-^\dagger c_+}_0 \\
& = \frac{1}{4}i(2n_+ - 2n_-) = \frac{1}{2}i\Sigma^z.
\end{aligned}$$

Podobnie wykazuje się pozostałe własności komutacyjne. **z.d.**

Skoro mamy identyczne własności komutacyjne dla  $\{\Sigma^\alpha\}$  oraz dla spinu  $1/2$ , to naturalne jest uważać  $\Sigma = [\Sigma^x, \Sigma^y, \Sigma^z]$  za jakiś rodzaj momentu pędu. Ta argumentacja niech nam tu wystarczy do utożsamienia  $\Sigma = [\Sigma^x, \Sigma^y, \Sigma^z]$  z operatorem momentu pędu elektronu.

### 12.5.2 Operatory spinowe i niezmienniczość $SU(2)$

Powyższe rozważania dotyczyły *jednego* elektronu na jednym węźle. Gdy mamy zbiór  $\Lambda$  węzłów, to operatory kreacji i anihilacji wyposażamy w dodatkowy indeks węzła  $i \in \Lambda$ . Całkowity moment pędu jest *sumą* momentów pędu poszczególnych cząstek, możemy więc zdefiniować *operator całkowitego momentu pędu*  $\hat{\mathbf{S}}_{(\text{tot})}$ :

$$\hat{\mathbf{S}}_{(\text{tot})} = [\hat{S}_{(\text{tot})}^{(x)}, \hat{S}_{(\text{tot})}^{(y)}, \hat{S}_{(\text{tot})}^{(z)}], \quad (294)$$

gdzie składowe są

$$\hat{S}_{(\text{tot})}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \sum_{i \in \Lambda} \sum_{a,b=1,2} c_{i,a}^\dagger \sigma_{ab}^\alpha c_{i,b}. \quad (295)$$

Z liczonych w poprzedniej Subsection wyrażeń łatwo zobaczyć, że składowe  $\hat{S}_{(\text{tot})}^{(\alpha)}$  spełniają reguły komutacji dla składowych momentu pędu. Można więc też – jak tam – zdefiniować operatory podnoszące i opuszczające:

$$\hat{S}_{(\text{tot})}^{(\pm)} = \hat{S}_{(\text{tot})}^{(x)} \pm i\hat{S}_{(\text{tot})}^{(y)}$$

Składowe operatora  $\hat{\mathbf{S}}_{(\text{tot})}$  są generatorami obrotów  $SU(2)$  w przestrzeni spinowej. Mówimy, że operator  $A$  jest  $SU(2)$ –niezmienniczy, jeśli komutuje ze składowymi  $\hat{S}_{(\text{tot})}^{(\alpha)}$  dla  $\alpha = x, y, z$ . Nieprecyzyjnie, ale obrazowo możemy powiedzieć, że operator  $SU(2)$ –niezmienniczy jest niezależny od sposobu wyboru osi w przestrzeni spinowej.

Typowym operatorem  $SU(2)$ –niezmienniczym jest operator liczby cząstek  $n_i = n_{i,+} + n_{i,-}$ . **z.d.** W ślad za tym, również operator całkowitej liczby cząstek  $N = \sum_{i \in \Lambda} n_i$  jest też

$SU(2)$ –niezmienniczy. Podobnie hamiltonian hoppingowy  $H_{\text{hop}}$  jest  $SU(2)$ –niezmienniczy, **z.d.** jako też hamiltonian oddziaływania. Niezmienniczość tego ostatniego łatwo zobaczyć, pisząc:

$$n_{i,+}n_{i,-} = \frac{1}{2}(n_i^2 - n_i).$$

Tak więc hamiltonian modelu Hubbarda jest  $SU(2)$ –niezmienniczy. Skoro tak, to można wykorzystać teorię momentu pędu (lub, z bardziej formalnego punktu widzenia, teorii reprezentacji grupy  $SU(2)$ ) do klasyfikacji stanów własnych ze względu na zachowane wielkości, tzn. liczby kwantowe. Symetrii mamy tu całkiem sporo: Otóż zauważmy, że komutują ze sobą operatory:

$$H; \quad (\hat{\mathbf{S}}_{(\text{tot})})^2 = (\hat{S}_{(\text{tot})}^{(x)})^2 + (\hat{S}_{(\text{tot})}^{(y)})^2 + (\hat{S}_{(\text{tot})}^{(z)})^2; \quad \hat{S}_{(\text{tot})}^{(z)}.$$

. Skoro komutują, to mają wspólny układ funkcji własnych; a więc stany własne hamiltonianu można klasyfikować przez wartości własne operatora kwadratu momentu pędu oraz jego rzutu na wybraną oś (tu:  $z$ ). Oznaczmy wartości własne operatora  $\hat{S}_{(\text{tot})}^{(z)}$  przez  $S_{(\text{tot})}^{(z)}$ , zaś operatora  $(\hat{\mathbf{S}}_{(\text{tot})})^2$  przez  $S_{(\text{tot})}(S_{(\text{tot})} + 1)$ . Będziemy nazywać liczbę  $S_{(\text{tot})}$  *całkowitym momentem pędu* danego stanu.

Oznaczmy:

$$S_{\text{max}} = \begin{cases} N_e/2 & \text{jeśli } N_e \leq N; \\ (2N - N_e)/2 & \text{jeśli } N_e \geq N. \end{cases} \quad (296)$$

Tak więc dopuszczalnymi wartościami całkowitego spinu  $S_{(\text{tot})}$  są  $0, 1, \dots, S_{\text{max}}$  jeśli  $N_e$  jest parzysta, oraz  $1/2, 3/2, \dots, S_{\text{max}}$  jeśli  $N_e$  jest nieparzysta.

Zapoznamy się teraz (z różnym stopniem szczegółowości) z różnymi tendencjami, (bądź ich brakiem) do uporządkowań magnetycznych. Będą to: AF, oraz FM, lub jego niemożliwość.

## 12.6 Jawne postaci macierzy Hama dla baby systems. Antyferromagnetyzm

### 12.6.1 Stany układu dwuwęzłowego

Uzbrojeni w wiedzę z końca poprzedniej Subsection, rozważmy układ tak mały, jak to jest możliwe dla nietrywialności wyniku, tzn. składający się z dwóch węzłów. Taki układ ma 4 możliwe stany na jednym węźle. Więc całkowita liczba stanów to  $4^2 = 16$ .

Wiemy, że całkowita liczba cząstek jest zachowana, więc poklasyfikujmy stany ze względu na liczbę cząstek.

| $N_e$ | stany  |
|-------|--|
| 0     | $ 0, 0\rangle$   |
| 1     | $ +, 0\rangle;  -, 0\rangle;  0, +\rangle;  0, -\rangle$                                 |
| 2     | $ +, +\rangle;  -, -\rangle;  +, -\rangle;  -, +\rangle;  \pm, 0\rangle;  0, \pm\rangle$ |
| 3     | $ \pm, +\rangle;  \pm, -\rangle;  +, \pm\rangle;  -, \pm\rangle$                         |
| 4     | $ \pm, \pm\rangle$   |

(297)

Teraz obliczymy wartości i wektory własne Hama dwucząstkowego.

Nie opłaca się oczywiście wypisywać pełnej macierzy  $16 \times 16$  hamiltonianu. Nie po to bowiem mamy dobre liczby kwantowe (liczba cząstek, całkowity spin oraz składowa  $z$ -owa całkowitego spinu, aby z nich nie korzystać. Nie będziemy wykorzystywać wszystkich liczb kwantowych naraz. Zaczniemy od sektorów o ustalonej liczbie cząstek.

o  $N_e = 0$ . Sektor jest mało ciekawy.  $H|0, 0\rangle = 0$ . Wektor  $|0, 0\rangle$  jest wektorem własnym o wartości własnej (energii) równej zeru. Koniec zabawy.

•  $N_e = 1$ . Zauważmy przede wszystkim, że jest tu jedna cząstka, więc nie będzie wkładu od  $H_{\text{int}}$ . Problem sprowadza się więc do hamiltonianu czysto hoppingowego. Mamy dalej podział stanów na dwa sektory: jeden o spinie '+' i jeden o spinie '-'. W każdym z tych sektorów, mamy problem jednocząstkowy na sieci o 2 węzłach – co było już analizowane w rozdziale o cząstkach nieoddziaływujących. (Dla formalności, wektorami własnymi są: W sektorze  $N_e = 1, S_z = +1/2$ :  $v_1 = |+, 0\rangle - |0, +\rangle$ ,  $\varepsilon_1 = \dots$ ;  $v_2 = |+, 0\rangle + |0, +\rangle$ ,  $\varepsilon_2 = \dots$ . W sektorze  $N_e = 1, S_z = -1/2$  analogicznie.)

••  $N_e = 2$ . Zajmijmy się najspierw stanami o  $S_z = \pm 1$ . Weźmy np.  $S_z = 1$ ; mamy jeden stan  $|+, +\rangle$  o energii równej zeru (część hoppingowa hamiltonianu daje tu zero, bo

na jednym węźle nie może być dwu jednakowych cząstek, a  $H_{\text{int}}|+, +\rangle = 0$ ). Dla stanu o  $S_z = -1$  analogicznie.

A teraz!! Co dla pozostałych stanów? Tu już występują 'smaczki' charakterystyczne dla układów wieloelektronowych. Są one na tyle istotne, że rozpatrzmy je w oddzielnej Subsection.

### 12.6.2 Half-filling i AntyFerromagnetyzm tamże

Tu rozważymy sytuację, gdy mamy dwa elektrony, o przeciwnych spinach (sytuację, gdy mają takie same spiny, rozważaliśmy wyżej). Przypadek, gdy ilość elektronów jest równa ilości węzłów, nazywamy 'half-filling' (bo 'maximal filling' to  $N_e = 2N$ ). Mamy tu więc half-filling.

Przestrzeń Hilberta stanów takiego układu ma bazę z czterech wektorów, które ponumerujemy następująco:

$$\mathbf{e}_1 = |\pm, 0\rangle, \quad \mathbf{e}_2 = |+, -\rangle, \quad \mathbf{e}_3 = |-, +\rangle, \quad \mathbf{e}_4 = |0, \pm\rangle \quad (298)$$

Wygodnie będzie utworzyć te wektory przez zadziałanie odpowiednich operatorów kreacji i anihilacji na próżnię.

I tu pojawia się problem: Jaką kolejność operatorów wziąć? Bo pamiętamy, że stan  $k$ -cząstkowy można utworzyć na  $k!$  sposobów, różniących się kolejnością operatorów. Nie stanowiłoby to problemu, gdyby nie *znak*, związane z przestawianiem.

Rozwiązujemy ten problem ustalając *jakąkolwiek*, ale *ustaloną* kolejność wszystkich  $2N$  (tu: 4) operatorów kreacji. Stany  $k$ -cząstkowe będziemy definiować, odnosząc się do tego wzorcowego uporządkowania. Takiemu ustawieniu  $k$  operatorów kreacji przypiszemy znak plus.

Wyberzmy więc wzorcową kolejność:

$$2_- ; 2_+ ; 1_- ; 1_+ \quad (299)$$

I tak, wektory  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_4$  utworzymy następująco:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= |\pm, 0\rangle = c_{1-}^\dagger c_{1+}^\dagger |0, 0\rangle \\ \mathbf{e}_2 &= |+, -\rangle = c_{2-}^\dagger c_{1+}^\dagger |0, 0\rangle \\ \mathbf{e}_3 &= |-, +\rangle = c_{2+}^\dagger c_{1-}^\dagger |0, 0\rangle \\ \mathbf{e}_4 &= |0, \pm\rangle = c_{2-}^\dagger c_{2+}^\dagger |0, 0\rangle \end{aligned}$$

Działania wszelkich operatorów na wektory bazy będziemy przekształcać tak, aby otrzymać powyższe uszeregowania operatorów kreacji.

Zobaczmy in details, jaką macierz dostaniemy dla operatora hoppingu:

$$T = -t(c_{1+}^\dagger c_{2+} + c_{2+}^\dagger c_{1+} + c_{1-}^\dagger c_{2-} + c_{2-}^\dagger c_{1-})$$

Z liniowości, możemy oddzielnie rozpatrzeć część operatora ze spinem 'w górę' i oddzielnie ze spinem 'w dół'.

Mamy więc, działając na kolejne stany operatorem  $c_{1+}^\dagger c_{2+}$ :

$$T\mathbf{e}_1 = c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{1-}^\dagger c_{1+} |0, 0\rangle = c_{1+}^\dagger c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{1-} |0, 0\rangle = 0;$$

$$T\mathbf{e}_2 = c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{2-}^\dagger c_{1+} |0, 0\rangle = c_{1+}^\dagger c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{2-} |0, 0\rangle = 0;$$

$$T\mathbf{e}_3 = c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{2+}^\dagger c_{1-}^\dagger |0, 0\rangle = -c_{1-}^\dagger c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{2+}^\dagger |0, 0\rangle = -c_{1-}^\dagger c_{1+}^\dagger (1 - c_{2+}^\dagger c_{2+}) |0, 0\rangle \\ = -c_{1-}^\dagger c_{1+}^\dagger |0, 0\rangle = -|\pm, 0\rangle = -\mathbf{e}_1;$$

$$T\mathbf{e}_4 = c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{2-}^\dagger c_{2+}^\dagger |0, 0\rangle = c_{2-}^\dagger c_{1+}^\dagger c_{2+} c_{2+}^\dagger |0, 0\rangle = c_{2-}^\dagger c_{1+}^\dagger |0, 0\rangle = |+, -\rangle = \mathbf{e}_2.$$

Układając, w sposób (hopefully) znany Czytelnikowi z kursu algebry, wyniki powyższych działań w macierz, otrzymamy macierz rozważanego operatora  $c_{1+}^\dagger c_{2+}$ :

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Licząc analogicznie macierz operatora  $c_{2+}^\dagger c_{1+}$ , dostaniemy

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Mamy jeszcze człony opisujące hopping elektronów ze spinem w dół. Liczenie elementów macierzowych operatorów odpowiadających temu zjawisku jest w pełni analogiczne do rachunków wyżej, więc je sobie podarujemy<sup>6</sup>

Dochodzi jeszcze macierz operatora  $H_{\text{int}}$ . Tu przypomnijmy sobie, że różne od zera są tylko elementy *diagonalne*, tzn. tu mamy niezerowe elementy (1, 1) oraz (4, 4).

Łącznie mamy macierz operatora (pamiętajmy, że dla macierzy hoppingu otrzymane wyżej wyniki trzeba pomnożyć przez  $-t$ ):

$$[T]_{\mathbf{e}}^{\mathbf{e}} = \begin{bmatrix} U & -t & t & 0 \\ -t & 0 & 0 & -t \\ t & 0 & 0 & t \\ 0 & -t & t & U \end{bmatrix} \quad (300)$$

Wartości i wektory własne tej macierzy są wszystkie niezdegenerowane i mają prostą postać (tzn. nie prowadzą do równań czwartego stopnia):

$$\varepsilon_1 = U; \quad \varepsilon_2 = 0; \quad \varepsilon_3 = u_+; \quad \varepsilon_4 = u_- \quad (301)$$

$$v_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}; v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}; v_3 = \begin{bmatrix} 2t \\ u_- \\ -u_- \\ 2t \end{bmatrix}; v_4 = \begin{bmatrix} 2t \\ u_+ \\ -u_+ \\ 2t \end{bmatrix}; \quad (302)$$

gdzie:

$$u_+ = \frac{1}{2}(U + \sqrt{U^2 + 16t^2}), \quad u_- = \frac{1}{2}(U - \sqrt{U^2 + 16t^2}).$$

Postarajmy się wycisnąć jakąś informację z tego gąszczy cyferek. (Programy symboliczne + numeryka dadzą nam dokładne informacje liczbowe czy konkretne rozwiązania. Mogą one wystarczyć do zrozumienia, ale nie muszą – wtedy trzeba jeszcze puścić w ruch mózgownicę...)

<sup>6</sup>Jak Al z Toy Story 2 podarował sobie... itd.

Na pierwszy ogień weźmy wektor  $v_2$ . Napiszmy go w postaci:  $v_2 = |+, -\rangle + |-, +\rangle$ . Kto miał do czynienia z teorią składania momentu pędu, to zapewne skojarzy, że łącznie ze stanami:  $v_+ = |+, +\rangle$  oraz  $v_- = |-, -\rangle$  tworzy on *tryplet* – zespół stanów o spinowej liczbie kwantowej  $S_{\text{tot}} = 1$  i składowych  $S_{\text{tot}}^z$  równych 0 (dla  $v_2$ ) oraz +1 (dla  $v_+$ ) i -1 (dla  $v_-$ ). Tę zgadywaną trzeba oczywiście potwierdzić, np. wypisując macierze operatorów  $\hat{S}_{\text{tot}}^2$  i  $\hat{S}_{\text{tot}}^z$  i sprawdzając, czy  $v_+, v_-, v_2$  są ich wektorami własnymi. Zostawiam to jako **z.d.** dla Czytelnika.

To teraz rozpatrzmy *stan podstawowy* w sektorze dwucząstkowym (dla  $U > 0$ ), tzn. wektor  $v_4$ . Jest to singlet, co sprawdzamy działając operatorami  $\hat{S}_{\text{tot}}^2$  i  $\hat{S}_{\text{tot}}^z$  (**z.d.**). Tu sprawdzimy ten fakt w wersji uproszczonej, a mianowicie dla  $U \gg t$ . Z dobrą dokładnością mamy wtedy:  $v_4 \approx |+, -\rangle - |-, +\rangle$ . Odwołajmy się do teorii składania momentów pędu. Z dwóch momentów pędu  $\pm 1/2$  można złożyć stan o całkowitym momencie pędu równym 1 (tryplet; przypadek ten rozpatrywaliśmy wyżej – dało się to nawet zrobić bez przybliżeń) oraz singlet  $|+, -\rangle - |-, +\rangle$ . Taki singlet wykazuje *korelację antyferromagnetyczną*, tzn.  $\langle \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \rangle < 0$ .

Bardziej formalnie przypadek ten można potraktować w ramach *rachunku zaburzeń*.

**Tu te dywagacje, prowadzące do Hama efektywnego AF Heisenberga.**

Pozostałe stany ( $v_1, v_3$ ) są mało na ogół ważnymi singletami wysokoenergetycznymi. (Sprawdzenie, że to singlety – **z.d.**)

Podsumujmy: Widzieliśmy, że w przypadku sieci dwudzielnej, (tak małej jak to tylko możliwe – ale nie mniejszej) i dla half-filling układ wykazuje (w stanie podstawowym) uporządkowanie *antyferromagnetyczne*. Okazuje się, że taka tendencja jest ogólnie preferowana. Tzn.: Jeśli mamy sieć dwudzielną oraz half-filling, to układ wykazuje korelacje antyferromagnetyczne (to nawet udowodniono) a jeśli układ ma wymiar 3 i  $t/U$  jest dostatecznie małe, to w dostatecznie niskich temperaturach układ wykazuje uporządkowanie antyferromagnetyczne dalekiego zasięgu. Tu dowodu nie ma, jest to **hipoteza** – zachęta dla słuchaczy wykładu do udowodnienia bądź sfalsyfikowania; są natomiast przekonujące wyniki przybliżone bądź numeryczne.

### 12.6.3 Klasyfikacja stanów ze względu na moment pędu

Zbadaliśmy więc sektory zawierające 0, 1 i 2 cząstki. Przypadek 3 cząstek jest prosty (**z.d.**) a czterech – trywialny. Wypiszmy więc podsumowanie, zawierające klasyfikację stanów ze względu na liczby kwantowe.

1.  $S_{\text{tot}} = 1$  (tryplet). Zawiera on 3 stany:  $|+, +\rangle$  ( $S_{\text{tot}}^z = 1$ );  $|-, -\rangle$  ( $S_{\text{tot}}^z = -1$ );  $|+, -\rangle + |-, +\rangle$  ( $S_{\text{tot}}^z = 0$ ).
2. Dublety:  $S_{\text{tot}} = 1/2$ . Mamy po 2 dublety 1-cząstkowe i 2 trzycząstkowe. Jednocząstkowe analizujemy tak jak już dobrze znamy, trzycząstkowe są zbudowane analogicznie:
  - $v_+^1 = |+, \pm\rangle + |\pm, +\rangle$ ,  $S_{\text{tot}}^z = +1/2$ ;  $v_-^2 = |-, \pm\rangle + |\pm, -\rangle$ ,  $S_{\text{tot}}^z = -1/2$ ;
  - $v_+^2 = |+, \pm\rangle - |\pm, +\rangle$ ,  $S_{\text{tot}}^z = +1/2$ ;  $v_-^2 = |-, \pm\rangle - |\pm, -\rangle$ ,  $S_{\text{tot}}^z = -1/2$ ;

Licząc na sztuki:  $2 \times 4 = 8$  stanów.

3. Singlety:  $|0, 0\rangle$ , energia 0, liczba cząstek 0;  $|\pm, \pm\rangle$ , energia  $2U$ , liczba cząstek 4; stany:  $v_1, v_3, v_4$

Razem 5 sztuk.

## 12.7 Jawne postaci macierzy Hama dla baby systems. Ferromagnetyzm (głównie) płaskodenny

### 12.7.1 Definicja ferromagnetyzmu nasyconego

Widzieliśmy, że w określonych warunkach, (sieć dwudzielna i half-filling) układ w stanie podstawowym wykazuje korelacje antyferromagnetyczne. Tu pokażemy, że w innych sytuacjach preferowane jest uporządkowanie *ferromagnetyczne*. Najsampierw sprecyzujemy, co rozumiemy przez stwierdzenie, że układ jest ferromagnetykiem.

W celu uniknięcia komplikacji technicznych, weźmiemy najmocniejszą definicję ferromagnetyzmu, tzw. *nasycony ferromagnetyzm*.

**Def.** Mówimy, że model Hubbarda wykazuje *nasycony ferromagnetyzm*, jeśli dowolny stan podstawowy posiada całkowity spin  $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}}$ .

Aby nieco bliżej poznać własności stanów modelu Hubbarda, które wykazują nasycony ferromagnetyzm, przypomnijmy jeszcze niektóre fakty z teorii momentu pędu. Otóż stan o całkowitym momencie pędu równym  $S$  jest  $(2S+1)$ -krotnie zdegenerowany, a przestrzeń stanów o całkowitym momencie pędu równym  $S$  jest rozpięta przez stany o rzucie momentu pędu na wybraną oś (zwykle  $z$ ) równych:  $S_z = -S, -S+1, \dots, S-1, S$ . Z jednej takiej podprzestrzeni do drugiej można przechodzić przez działanie operatorem podnoszącym (opuszczającym) składową  $z$  momentu pędu. Wszystkie więc te  $2S+1$  stanów jest równoważnych i można bez straty ogólności wybrać jeden z nich. Wybierzmy, jako takiego reprezentanta  $\Phi_{\text{G.S.}}$ , stan o największej  $z$ -owej składowej momentu pędu, równej  $S^z = S_{\text{tot}} = S_{\text{max}}$ . Ponieważ  $\Phi_{\text{G.S.}}$  zawiera tylko elektrony o spinie 'w górę', więc mamy  $H_{\text{int}}\Phi_{\text{G.S.}} = 0$ . (Przy założeniu, że  $N_e \leq N$ ). To znaczy, że  $\Phi_{\text{G.S.}}$  jest stanem o najniższej energii dla  $H_{\text{hop}}$  w podprzestrzeni  $N_e$  elektronów 'up'. Przypominając sobie, jak się konstruuje stany własne  $H_{\text{hop}}$  (wz. (287) i (289)), mamy wyrażenie na poszukiwany ferromagnetyczny stan podstawowy:

$$\Phi_{\text{G.S.}} = \left( \prod_{j=1}^{N_e} a_{j,\uparrow}^\dagger \Phi_{\text{vac}} \right) \quad (303)$$

(gdzie  $a_{j,\sigma}^\dagger$  jest definiowany przez XXXX), energia którego wynosi

$$E_{\text{G.S.}} = \sum_{j=1}^{N_e} \varepsilon_j \quad (304)$$

Jeżeli mamy  $\varepsilon_{N_e} < \varepsilon_{N_e+1}$ , to stan (303) jest niezdegenerowanym stanem podstawowym w przestrzeni o  $S_{\text{tot}}^z = S_{\text{max}}^z$ . Pozostałe stany  $\Phi_M$ , o  $z$ -towej składowej równej  $M$ , można uzyskać ze stanu (303) przez zadziałanie stosowną ilość razy operatorem obniżającym:

$$\Phi_M = (\hat{S}_{\text{tot}}^-)^{(S_{\text{max}}-M)} \Phi_{\text{G.S.}}$$

(stan ten na ogół nie jest unormowany).

Powyższa prosta konstrukcja ferromagnetycznych stanów podstawowych była oparta na fakcie, że dowolny stan podstawowy z  $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}}$  *nie czuje* oddziaływania międzycząstkowego. Dzięki temu takie stany sprowadzają się do stanów podstawowych układów swobodnych fermionów. Fakt ten jest specyficzny dla modelu Hubbarda i nie ma na ogół miejsca dla innych modeli.

Stąd też można podejrzewać, że zasadniczym czynnikiem przy opisie magnetyzmu w modelu Hubbarda są własności *członu kinetycznego*.



### 12.7.2 Stany modelu 3-węzłowego

Sporo ogólnych cech modelu Hubbarda dla sieci dwudzielnej i przy half-filling było widoczne już w analizie najprostszego 2-węzłowego modelu. Podobną analizę przeprowadzimy teraz dla modelu 3-węzłowego o wypełnieniu  $2/3$  (tzn. dwu elektronach). Okazuje się, że sporo jego właściwości (ferromagnetyzm w stanie podstawowym) występuje też dla większych układów.

Sektor 2-cząstkowy układu 3-węzłowego liczy 15 stanów. Wyliczmy je:

1.  $S_{\text{tot}}^z = +1$ :  $P_1 = |+, +, 0\rangle$ ,  $P_2 = |+, 0, +\rangle$ ,  $P_3 = |0, +, +\rangle$ ;
2.  $S_{\text{tot}}^z = -1$ :  $M_1 = |-, -, 0\rangle$ ,  $M_2 = |-, 0, -\rangle$ ,  $M_3 = |0, -, -\rangle$ ;
3.  $S_{\text{tot}}^z = 0$ :  $e_1 = |\pm, 0, 0\rangle$ ,  $e_2 = |0, \pm, 0\rangle$ ,  $e_3 = |0, 0, \pm\rangle$ ;  
 $e_4 = |+, -, 0\rangle$ ,  $e_5 = |+, 0, -\rangle$ ,  $e_6 = |-, +, 0\rangle$ ,  $e_7 = |-, 0, +\rangle$ ,  $e_8 = |0, +, -\rangle$ ,  $e_9 = |0, -, +\rangle$ .

Stąd widać, że będziemy tu mieli trzy tryplety i resztę (tzn.  $15 - 3 \cdot 3 = 6$  singletów).

Stałą oddziaływania kulombowskiego weźmiemy dla wszystkich węzłów jednakową i równą  $U \geq 0$ , a co do stałych przeskoku, to rozważymy dwie sytuacje: Kiedy wszystkie stałe są równe oraz kiedy dwie są równe.

### 12.7.3 Ogólna postać macierzy Hama

Tu weźmiemy ogólną postać stałych hoppingu:  $t_{1,2} = t_{1,3} = t'$ ,  $t_{2,3} = t$ .

W sektorze złożonym z samych plusów (tzn.  $S_{\text{tot}}^z = +1$ ) macierzą Hama jest  $S_{\text{tot}}^z = -1$

$$H^{(+1)} = \begin{bmatrix} 0 & -t' & -t' \\ -t' & 0 & t \\ -t' & t & 0 \end{bmatrix} \quad (305)$$

*Uwaga:* Stosujemy konwencję znakową  $H_{\text{hop}} = -t \sum (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma})$  (przeciwnie niż u Tasakiego).

W sektorze złożonym z samych minusów (tzn.  $S_{\text{tot}}^z = -1$ ) jest tak samo.

No to teraz! Środkowy, największy sektor o  $S_{\text{tot}}^z = 0$ . Macierzą Hama jest (**z.d. 3p.**):

$$H^{(0)} = \begin{bmatrix} U & t' & t' & -t' & 0 & 0 & -t' & 0 & 0 \\ t' & 0 & -t & 0 & t' & 0 & 0 & t' & 0 \\ t' & -t & 0 & 0 & 0 & -t' & 0 & 0 & t' \\ -t' & 0 & 0 & 0 & -t' & t' & -t & 0 & 0 \\ 0 & t' & 0 & -t' & U & t & 0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t' & t' & t & 0 & 0 & 0 & t \\ -t' & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & -t' & -t' \\ 0 & t' & 0 & 0 & -t & 0 & -t' & 0 & -t \\ 0 & 0 & t' & 0 & 0 & t & -t' & -t & U \end{bmatrix} \quad (306)$$

### 12.7.4 Przypadek równych stałych przeskoku

Rozpatrzmy najspierw sytuację, gdy wszystkie stałe są równe  $t = t' = -1$ . Wtedy w sektorze  $S_{\text{tot}}^z = +1$  mamy:

$$H^{(+1)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

której wartości własne są (ćw. z Algebry lub Matematyki):  $-2, 1, 1$ . Zatem:

*Tryplety mają energie:  $-2, 1, 1$ , energia zatem stanu podstawowego w sektorze trypletowym wynosi  $-2$ .*

To teraz zobaczymy energie własne w sektorze o  $S_{\text{tot}}^z = 0$ . Darujemy tu sobie<sup>7</sup> wypisywanie macierzy Hama. Okazuje się, że Maple<sup>TM</sup> potrafi sobie poradzić z obliczeniem wartości własnych!!! i są one:

$$E_1 = -2, E_2 = 1 + \frac{1}{2}U + \frac{1}{2}\sqrt{36 - 4U + U^2}, E_3 = 1 + \frac{1}{2}U - \frac{1}{2}\sqrt{36 - 4U + U^2},$$

$$E_4 = 1, E_5 = \frac{1}{2}U - \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{U^2 + 2U + 9}, E_6 = \frac{1}{2}U - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{U^2 + 2U + 9},$$

$$E_7 = 1, E_8 = \frac{1}{2}U - \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{U^2 + 2U + 9}, E_9 = \frac{1}{2}U - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{U^2 + 2U + 9}$$

Zwróćmy uwagę, że  $E_2, E_4, E_7$  są identyczne jak energie z sektora  $S_{\text{tot}}^z = +1$ , identyfikujemy je więc ze składowymi  $S_{\text{tot}}^z = 0$  trypletów. Pozostałe wartości własne muszą odpowiadać singletom. Kto nie wierzy, niech podziela macierzami kwadratu momentu pędu na wektory własne odpowiadające wyliczonym wyżej wartościom własnym. (**z.d.**).

Wykres otrzymanych energii własnych jako funkcji  $U$  przedstawiono na **RYS.** (TasakiToy). Widać, że dla dowolnego  $U > 0$ , stanem podstawowym jest tryplet – stan o największej możliwej magnetyzacji, zatem dla dowolnego  $U > 0$  mamy tu nasycony ferromagnetyzm.

### 12.7.5 Inne układy

Można powyższe rozważania powtórzyć w przypadku  $t \neq t'$ ; na wartości własne  $H^{(0)}$  otrzymuje się tu wszelako równanie czwartego stopnia, którym – jeśli by chciał – Czytelnik może się, analitycznie bądź numerycznie, pobawić. (**\*z.d. 4p.**). Konkluzja jest tu taka, że podstawowy stan ferromagnetyczny pojawia się powyżej krytycznej wartości  $U$  (zależnej od ilorazu  $t/t'$ ). Np. u Tasakiego, dla  $t = t'/2$ , ferromagnetyczny stan podstawowy występuje dla  $U > 2.8$ .

Sytuacja podobna do tej, którą śledziliśmy wyżej (ładnie i dokładnie jest to opisane u Tasakiego), ma miejsce ferromagnetyzmu w modelach płaskodennych (w łańcuchu sawtooth bądź na sieci kagomé), gdzie udowodniono pojawianie się nasyconego ferromagnetyzmu w stanach podstawowych przy określonych wypełnieniach. Np. udowodniono następujący wynik dla sieci kagomé [20].

**Tw.** (Mielke '93) Rozważmy model Hubbarda na sieci kagomé przy wypełnieniu  $\rho = N_e/N = 1/3$ , przy wszystkich stałych przeskoiku jednakowych i przy wszystkich stałych oddziaływania niezależnych od węzła i równych  $U$ . Wtedy przy dowolnym  $U > 0$ , stan podstawowy wykazuje nasycony ferromagnetyzm.

Morał (heurystyczny) – czynniki sprzyjające FM: ● frustracja, ● out-of-half-filling.

Przy takich warunkach, pokazano pojawianie się ferromagnetyzmu (również w dodatnich temperaturach) w  $d = \infty$ , przy użyciu tzw. metody DMFT.

## 12.8 Wielopasmowy model Hubbarda i periodyczny model Andersona. Ferromagnetyzm wędrowny ('itinerant')

A. Einstein miał powiedzieć, że 'rozwiązanie jakiegoś problemu fizycznego powinno być tak proste, jak to tylko możliwe – ale nie prostsze'. Dobrze to pasuje do sytuacji, gdy

<sup>7</sup>Podobnie jak Al... itd.

chcielibyśmy opisać ferromagnetyzm żelaza czy niklu przy pomocy modelu Hubbarda.

Wyniki z poprzedniego rozdziału są bardzo ważne i dają duży wgląd w naturę pojawiania się ferromagnetyzmu w modelu Hubbarda. Jednak nie mogą bezpośrednio opisać magnetyzmu w realistycznych sytuacjach. Po pierwsze, nasze rozważania dotyczyły *stanu podstawowego*, a chcielibyśmy mieć ferromagnetyzm w skończonych temperaturach. Skądinąd wiadomo (tw. Mermin-Wagnera i jego rozszerzenia), że w modelach jedno- i dwuwymiarowych w układach z symetrią ciągłą (model Hubbarda do takich należy – ma on grupę sym.  $SU(2)$ , a nawet większą) nie może być uporządkowań magnetycznych (i innych) w niezerowych temperaturach. Po drugie, ferromagnetyzm w takich sytuacjach jak sieć kagomé jest magnetyzmem *izolatorów* (mocno zdegenerowane pasmo stanu podstawowego jest całkowicie wypełnione, a pasmo nad przerwoą energetyczną jest puste), a chcielibyśmy mieć ferromagnetyzm *metaliczny* – wykazywany przez elektrony wędrownie ('itinerant').

Z tego powodu, należałoby model Hubbarda rozszerzyć, aby zbliżyć go do rzeczywistości fizycznej.

Opiszemy tu rozszerzenie polegające na uwzględnieniu faktu, że atomy sieci mają nie jeden, a wiele orbitali. I tak np. przy analizie magnetyzmu w żelazie czy niklu musimy wziąć pod uwagę fakt, że dla magnetyzmu najistotniejsze są orbitale  $d$ , których jest 5 rodzajów (tę liczbę można zmniejszyć, biorąc pod uwagę, iż 5-krotnie zdegenerowane stany  $d$  rozszczepiają się w polu krystalicznym, dając, np. w polu o symetrii kubicznej, 3 najniżej leżące orbitale). W ten sposób, dojdziemy do naturalnego rozszerzenia modelu z hamiltonianem (281), gdzie operatory kreacji i anihilacji (oraz współczynniki) mają jeszcze indeks orbitalowy. Dochodzimy więc do ogólnej postaci hamiltonianu:

$$\hat{H} = \sum_{i,j;a,b;\sigma} t_{ij}^{ab} c_{i,a,\sigma}^\dagger c_{j,b,\sigma} + \sum_{ijkl;spdf;\sigma,\sigma'} V^{spdf} c_{i,s,\sigma}^\dagger c_{j,p,\sigma'}^\dagger c_{l,d,\sigma'} c_{k,f,\sigma} \quad (307)$$

Postać ta jest ogólna, ale mało czytelna. Wymieńmy więc szczególne przypadki, które w naturalny sposób pojawiają się przy analizie Hama (307).

### 12.8.1 Multi-band HuM

Zakładamy tu, iż elektrony z dobrym przybliżeniem zachowują swoją tożsamość przy przeskokach między węzłami (oraz na węzłach). Ponadto zakładamy, że w oddziaływaniu czterofermionowym najistotniejsze są człony, które – tak się składa – mają wyrazistą interpretację fizyczną.

**Multiband Hubbard model:** Consider the system in which two species of spin one-half particles (let's call them  $d$  and  $f$  electrons) are present. Assume that the Hamiltonian describing the system has the following form ("two-band Hubbard model"):

$$H_{\text{Hub};df} = T_d + T_f + V_d + V_f + V_{df} + S, \quad (308)$$

where:

$$T_d = -t_d \sum_{\langle ij \rangle; \sigma = \pm} (d_{i,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + \text{h.c.}), \quad T_f = -t_f \sum_{\langle ij \rangle; \sigma = \pm} (f_{i,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + \text{h.c.}); \quad (309)$$

$$V_d = U_d \sum_i n_{d;i,+} n_{d;i,-}; \quad V_f = U_f \sum_i n_{f;i,+} n_{f;i,-}; \quad V_{df} = U_{df} \sum_i n_{f;i} n_{d;i}; \quad (310)$$

$$S_{\text{Heis}} = - \sum_{i;\alpha} J_\alpha s_{f;i}^\alpha s_{d;i}^\alpha, \quad (311)$$

Here:  $\sigma$  is the spin index;  $i$  – site index;  $n_{a;i} = n_{a;i,+} + n_{a;i,-}$  ( $a$  is the band index, so in our case it assumes the values  $d$  and  $f$ );  $s_{a;i}^\alpha$  is the *spin operator*, being the bilinear combination of creation and annihilation operators:  $s_{a;i}^\alpha = \sum_{\eta,\eta'} \sigma_{\eta,\eta'}^\alpha a_{\eta}^\dagger a_{\eta'}$ , where  $\sigma_{\eta,\eta'}^\alpha$  is  $\alpha$ -th Pauli matrix.

The model defined by (308) and (311) is a slightly generalized two-band Hubbard model with Hund on-site interaction, studied in numerous papers, mainly in the context of metallic ferromagnetism.

### 12.8.2 Periodic Anderson model

Tu zakładamy, iż elektrony, należące do różnych orbitali, mogą się *mieszać*, tzn. że ma miejsce *hybrydyzacja*.

W najprostszej (może nie najprostszej, ale w miarę prostej) wersji zaóóźmy, że mamy dwa rodzaje orbitali na każdym węźle; nazwijmy je  $d$  oraz  $f$ . Elektrony każdego rodzaju mogą skakać po sieci, co opisują człony  $T_d$  oraz  $T_f$ . Mogą ponadto *hybrydyzować*, co opisuje człon  $M_{df}$ . Wreszcie oddziałują na węzłach oddziaływaniem 'on-site', co opisują człony  $V_d$ ,  $V_f$  oraz  $V_{df}$ .

Mamy zatem:

$$H_{\text{PAM}} = T_d + T_f + V_d + V_f + V_{df} + M_{df}, \quad (312)$$

Większość z tych członów była zdefiniowana wyżej przez wzory (??) i (310), tak że pozostaje tylko napisać wyrażenie na człon hybrydyzacyjny:

$$M_{df} = m^{is} \sum_{\langle ij \rangle; \sigma = \pm} (d_{i,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + \text{h.c.}) + m^{os} \sum_{i; \sigma = \pm} (d_{i,\sigma}^\dagger f_{i,\sigma} + \text{h.c.}) \quad (313)$$

gdzie  $is$  oznacza 'inter-site', zaś 'os' – 'on-site'.

Model Andersona został przez niego zaproponowany do opisu problemu domieszki magnetycznej w macierzy niemagnetycznej [?]. Oryginalny hamiltonian Andersona miał mniej wyrazów były tam jedynie  $T_d$ ,  $V_{df}$  i wyrazy hybrydyzacyjne. Później zaczęto rozpatrywać model Andersona jako naturalną modyfikację modelu Hubbarda i stosować do opisu skorelowanych elektronów wszędzie tam, gdzie mamy podejrzenie (lub pewność), że istotne jest mieszanie się elektronów z różnych orbitali.

Dla obydwu modeli – wielopasmowego HuM'a i PAM'a – praktycznie nie mamy ścisłych metod analizy.

- Istnieją różne wyniki ściśle przeważnie dla stanów podstawowych dla wąskich podzbiorów przestrzeni parametrów.
- Są metody Hartree-Focka oraz niewolniczych bozonów ('slave bosons'), ale trudno powiedzieć, na ile przybliżenia te są wiarygodne. W wielu sytuacjach intuicja fizyczna podpowiada, że są.
- Jest też metoda DMFT ('dynamical mean field theory'), pozwalająca na analizę układu w nieskończonej liczbie wymiarów, co – jak się okazuje – bardzo analizę upraszcza. Otrzymano w ten sposób bardzo wiele wyników dla różnych wielkości, zarówno statycznych, jak i dynamicznych [21]. Naczelnym pytaniem o zasadność wyników DMFT jest, jak daleko jest od 3 do nieskończoności. W wielu sytuacjach można argumentować, że całkiem blisko i że analiza układów silnie skorelowanych metodą DMFT jest wiarygodna dla układów trójwymiarowych.

## 13 ZADANIA

*Uwaga.* Do wielu zadań można znaleźć wskazówki, bądź rozwiązania, w książkach [1], [2], [3], [4]. Zachęcam jednak do samodzielnej pracy, i ew. porównania ze znanymi rozwiązaniami *po*, a nie *przed* rozwiązywaniem.

1. Znaleźć ilość stanów związanych w jamie prostokątnej o głębokości  $U = 2$  i szerokości  $a = 3$  (1p). Znaleźć też funkcje własne stanu o najwyższej i najniższej energii, (1p) + wykresy (0.5p).
2. Znaleźć poziomy energetyczne i funkcje falowe cząstki w otencjale  $V(x) = \frac{U}{\cosh^2(x/a)}$  (3p). Za ilustrację tzn. wartości energii z dokładnością numeryczną, + wykresy f. falowych dla  $U = 2$ ,  $a = 3$ , dodatkowo 1.5p.
3. Znaleźć stany własne i energie własne cząstki w symetrycznym potencjale 'V', tzn. równego 0 dla  $|x| > a$ , oraz  $A(\frac{|x|}{a} - 1)$  dla  $|x| < a$  (3p.) Zilustrować funkcjami własnymi i energiami własnymi dla  $A = 3$ ,  $a = 4$  + wykresy (1.5p)
4. \* Wyprowadzić oszacowanie Calogero (91) (4 p) *Wsk.* Reed, Simon IV
5. Znaleźć współczynnik przejścia przez paraboliczną barierę potencjału (2.5 p.) + wykres współczynnika przejścia w funkcji energii (1 p).
6. Znaleźć widmo cząstki w potencjale kawałkami parabolicznym z płaskimi przerwami między parabolami. (3p); ilustracja 1.5p
7. Potencjał symetryczny  $W$  (tzn. kawałkami liniowy) double well (3p.), za ilustrację 1.5p.
8. \* Rezonans z niezerowymi częściami rzeczywistą i urojoną w potencjale udu prostokątnym (4 p).

### Numerki

9. N Stany związane w potencjale Lennarda-Jonesa (2.5 p).
10. N Kwartyczne double well (2.5 p)
11. N Stany związane w 2, 4, 6 i 8 studniach parabolicznych obok siebie (3 p.)

### Modele sieciowe 1-d

12. Pokazać zależności asymptotyczne gęstości stanów (166) i (167).
13. Znaleźć: Warunki na dopuszczalne energie (wzory); energie jako funkcje  $k$  (rysunki – a wzory, jeśli komuś uda się znaleźć jawne, to jak najbardziej); oraz gęstości stanów dla potencjałów (wzory + rysunki) dla potencjałów o okresie 4 i 5:
  - (a)  $0, 0, 0, U, 0, 0, 0, U, \dots$
  - (b)  $0, 0, 0, 0, U, 0, 0, 0, 0, U, \dots$
  - (c)  $0, U, 0, 0, U, 0, U, 0, 0, U, \dots$

### Modele sieciowe 2-d

14. Przeprowadzić analizę punktów krytycznych dla  $E_{\mathbf{k}}^2$  na sieci heksagonalnej (1p)
15. Przeprowadzić analizę punktów krytycznych dla  $E_{\mathbf{k}}^2$  w przypadku  $t' \neq 0$  (1.5p)
16. Otrzymać  $E_{\mathbf{k}}$  dla cząstek swobodnych na sieci heksagonalnej z potencjałem Néela (1.5p.)
17. \* DOS dla grafenu (3.5p.)
18. Zanalizować znikanie przerwy energetycznej przy zmianie  $U$  dla potencjału Néel 3. *Wsk.* W momencie znikania przerwy energetycznej dwa pierwiastki równania na  $E_{\mathbf{k}}$  stają się równe, zatem nie jest konieczne stosowanie wzorów Cardano.
19. \* Analiza układu z trzema stałymi przeskoku i znalezienie przypadków, kiedy DOS da się policzyć analitycznie, i policzenie przypadku zdegenerowanego (3.5p.)
20. Stwierdzić numerycznie, czy będzie lokalizacja Andersona w 1d, dla modelu bez potencjału, ale z przypadkowymi *stałymi przeskoku*. Są tu oczywiście różne możliwości realizacji (np. stałe mają wartość  $-t$  z prawdopodobieństwem  $p$  i wartość  $+t$  z prawdopodobieństwem  $1 - p$ ). Zaproponować też jakąś własną realizację przypadkowych stałych przeskoku. (2.5 p)
21. Ilustracje (poprzedzone wyliczankami) lokalizacji Andersona w 2d (2.5p.)
22. Pouzupełniać brakujące rachunki dla modelu Hubbarda, zaznaczone jako **z.d.** w rozdziale mu poświęconym.

**Zaliczenie:** Od 10 p.

**Skala ocen:** 10-12: 3; 12-14: 3+; 14-16: 4; 16 i powyżej: 4+. Kto chce mieć 5, musi przedstawić rozwiązanie przynajmniej jednego z problemów z gwiazdką.

## Literatura

- [1] L. I. Schiff, *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa 1977.
- [2] L. D. Landau, E. M. Lifszyc: *Mechanika kwantowa. Teoria nierelatywistyczna*, PWN, Warszawa 1980.
- [3] J. Brojan, J. Mostowski, K. Wódkiewicz: *Zbiór zadań z mechaniki kwantowej*, PWN, Warszawa 1976.
- [4] S. Flügge: *Practical Quantum Mechanics*. Springer Verlag, Berlin – Heidelberg – New York, 1999.
- [5] S. Brandt, H. D. Dahmen: *Mechanika kwantowa w obrazach*, PWN, Warszawa 1989.
- [6] P. Urbański: *Analiza funkcjonalna II*, notatki na stronie www:
- [7] M. Reed, B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics, IV. Analysis of Operators*. Academic Press, 1978
- [8] J. Dereziński, notatki na stronie wydziałowej;
- [9] E. T. Whittaker, G. N. Watson, *Kurs analizy współczesnej, t. II*
- [10] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. H. Vetterling, B. P. Flannery: *Numerical Recipes: The art of Scientific Computing (C version)*, Cambridge University Press 1997
- [11] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin: *Fizyka ciała stałego*, PWN, Warszawa 1986.
- [12] A. Riera: *An introduction to Anderson localization*, pdf presentation.
- [13] P. W. Anderson, *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*. *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [14] Anderson Localization – Wikipedia.
- [15] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Band*. *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [16] M. C. Gutzwiller: *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963); *Phys. Rev. A* **137**, 1726 (1965).
- [17] J. Kanamori: *Prog. Theor. Phys.* **30**, 275 (1963).
- [18] E. H. Lieb. . In: *Advances in dynamical systems and quantum physics*, Proc. of the May 1993 Conference in honour of G. F. Dell’Antonio (World Scientific).
- [19] J. Wojtkiewicz: *O modelu Hubbarda słów kilka*. *Postępy Fizyki* **58**, 66 (2007).
- [20] H. Tasaki, *From Nagaoka ferromagnetism to flat-band ferromagnetism and beyond – an introduction to ferromagnetism in Hubbard model*. *Prog. Theor. Phys.* **99** (1998).
- [21] Harrison, W. A.: *Teoria ciała stałego*. PWN, Warszawa 1976
- [22] *The LDA+DMFT approach to strongly correlated materials*. Lecture Notes of the Autumn School 2011. E. Pavarini, E. Koch, A. Lichtenstein and D. Vollhardt, eds. Jülich, 2011