NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITETET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Alex Hansen
Tlf. 93649

KONTINUASJONSEKSAMEN I FAG 74436 KVANTETEORIEN FOR FASTE STOFFER
Onsdag 20. august, 1997
kl. 0900–1300

Tillatte hjelpemidler: Rottmann: Matematische Formelsammlung
Rottmann: Matematisk formelsamling
Barnett and Cronin: Mathematical Formulae
Godkjent kalkulator

Oppgave 1

Vi skal i denne oppgaven først se generelt på andre-kvantisering. Deretter skal vi pense inn på Hubbard modellen. Anta en første-kvantisert Hamilton for N elektroner i en krystall på formen

$$H_1 = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_j u_j(\vec{r}_i) \right] + \sum_{i<j}^{N} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \,, \tag{1}$$

hvor $u_j(\vec{r})$ representerer vekselvirkningen mellom elektronene og ion j i krystallen, og $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ representerer vekselvirkningen mellom elektron 1 og 2. Videre anta at $\{\varphi_\lambda(\vec{r}, s)\}$ danner et fullstendig sett. s er spinn-variabelen.

a) Skriv ned den andre-kvantiserte Hamilton-operatoren som tilsvarer (1) i den generelle φ_λ-basisen. Hvordan er matrise-elementene som inngår definert?

La oss nå anta at

$$\varphi_{\lambda=(\vec{k},\sigma)}(\vec{r}, s) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} \chi_\sigma(s) \tag{2}$$

som er egenfunksjonene til den kinetiske energi-operatoren. Her er $\chi_\sigma(s)$ spinn-bølgefunksjonen.

b) Hvordan ser den andre-kvantiserte Hamilton-operatoren ut i denne basisen? Gi en diagrammatisk tolkning av hvert ledd. Under hvilke forhold er denne basisen nyttig?

Anta nå at

$$\varphi_{\lambda=(j,n,\sigma)}(\vec{r},s) = \phi_{j,n}(\vec{r})\chi_\sigma(s) \tag{3}$$

hvor $\phi_{j,n}(\vec{r})$ er atom-orbital n sentrert på ion j i posisjon $\vec{R}_j$, $u_j(\vec{r}) = u(\vec{r},\vec{R}_j)$. $\phi_{j,n}(\vec{r})$ oppfyller ligningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + u_j(\vec{r})\right]\phi_{j,n}(\vec{r}) = \epsilon_n\phi_{j,n}(\vec{r})\,. \tag{4}$$

c) Vis at den andre-kvantiserte Hamilton-operatoren i denne basisen kan skrives

$$\begin{aligned} H_2 &= \sum_{j,n,\sigma}\epsilon_n c^\dagger_{j,n,\sigma}c_{j,n,\sigma} + \sum_{n,j,m,i,\sigma} t^{n,m}_{j,i}c^\dagger_{j,n,\sigma}c_{i,m,\sigma} \\ &+ \tfrac{1}{2}\sum_{j_1,j_2,j_3,j_4}\sum_{n_1,n_2,n_3,n_4}\sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4} V^{n_1,n_2;n_3,n_4}_{j_1,j_2;j_3,j_4}\,\delta_{\sigma_1,\sigma_4}\,\delta_{\sigma_2,\sigma_3} \\ &\quad c^\dagger_{j_1,n_1,\sigma_1}c^\dagger_{j_2,n_2,\sigma_2}c_{j_3,n_3,\sigma_3}c_{j_4,n_4,\sigma_4}\,. \end{aligned} \tag{5}$$

Uttrykk $t^{n,m}_{j,i}$ og $V^{n_1,n_2;n_3,n_4}_{j_1,j_2;j_3,j_4}$ eksplisitt som matriseelementer.

Hubbard Hamilton-operatoren er

$$H = t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma} c^\dagger_{i,\sigma}c_{j,\sigma} + \tfrac{V}{2}\sum_{j,\sigma} n_{j,\sigma}n_{j,-\sigma} \tag{6}$$

hvor $n_{j,\sigma} = c^\dagger_{j,\sigma}c_{j,\sigma}$ er telleoperatoren. $\langle\ldots,\ldots\rangle$ betyr sum over nærmeste naboer.

d) Gjør og diskuter de fysiske antagelser som er nødvendige for å komme fra uttrykket i (5) til Hubbard-modellen i (6).

Vi ser nå på Hubbard-modellen for en krystall bestående av to ioner — et problem som ble løst av Falicov og Harris i 1969.

e) Hvordan ser Hubbard-modellen ut i dette tilfellet? Hvor mange forskjellige energi-egentilstander har modellen nå?

f) Finn alle energinivåene i dette systemet. Anta at $t = -1$. (Hint: Regn systematisk ut energiene for ingen, ett, to, tre og fire elektroner i systemet. Vær forberedt på å diagonalisere matriser. To-elektrontilfellet medfører mest arbeid.)

Oppgave 2

Vi ser i denne oppgaven på den antiferromagnetiske Heisenberg-modellen for en $S = 1/2$ isolator i to dimensjoner. Hamilton-operatoren er gitt ved

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \,. \tag{7}$$

Anta kvadratisk gitter. $\langle \ldots, \ldots \rangle$ betyr sum over nærmeste naboer.

a) Hvilket fortegn må J ha for at dette skal være en antiferromagnet?

b) Vis at grunntilstanden på det kvadratiske gitteret kan deles opp i to ferromagnetiske undergittere. Vi kaller disse gitterne A og B.

Spinn operatorene $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ oppfyller kommutasjonsrelasjonene $[S_i^x, S_j^y] = i\delta_{i,j} S_i^z$, $[S_i^y, S_j^z] = i\delta_{i,j} S_i^x$ og $[S_i^z, S_j^x] = i\delta_{i,j} S_i^y$. Vi definerer spinn stige og senke-operatorene $S_i^{\pm} = S_i^x \pm i S_i^y$ som da oppfyller kommutatorene $[S_i^z, S_j^{\pm}] = \pm\delta_{i,j} S_j^{\pm}$ og $[S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{i,j} S_j^z$.

c) Vis at Heisenberg Hamilton-operatoren blir uttrykt ved disse komponentene

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^z S_j^z + S_i^+ S_j^- \right) \,. \tag{8}$$

Vi studerer nå lavenergetiske eksitasjoner på grunntilstanden. Dette gjøres gjennom bruk av Holstein-Primakoff transformasjonen. På undergitter A definerer vi denne som $S_i^z = 1/2 - a_i^\dagger a_i$, $S_i^+ = (1 - a_i^\dagger a_i)^{1/2} a_i$ og $S_i^- = a_i^\dagger (1 - a_i^\dagger a_i)^{1/2}$. På undergitter B definerer vi $S_i^z = -1/2 + b_i b_i^\dagger$, $S_i^+ = (1 - b_i b_i^\dagger)^{1/2} b_i^\dagger$ og $S_i^- = b_i (1 - b_i b_i^\dagger)^{1/2}$. a_i og b_i er boson-operatorer: $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}$, $[a_i, a_j] = 0$, $[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{i,j}$, $[b_i, b_j] =$, $[a_i, b_j] = 0$ og $[a_i, b_j^\dagger] = 0$.

d) Vis at Hamilton-operatoren til kvadratisk orden i a_i og b_i operatorene kan skrives

$$H = E_0 - 4J \sum_{i \in A} a_i^\dagger a_i - 4J \sum_{j \in B} b_j^\dagger b_j - J \sum_{\langle i \in A, j \in B \rangle} \left(a_i^\dagger b_j^\dagger + a_i b_j \right) \tag{9}$$

hvor E_0 er en konstant.

Vi uttrykker nå a_i og b_j operatorene ved deres Fourier-komponenter. Altså, vi definerer $a_{\vec{q}} = (1/\sqrt{N_A}) \sum_{i \in A} a_i \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_i)$ og $b_{\vec{q}} = (1/\sqrt{N_B}) \sum_{j \in B} b_j \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_j)$. N_A og N_B er antall gitterpunkter i undergitterne A og B.

e) Vis at (9) kan skrives

$$H = E_0 - 4J\sum_{\vec{q}}\left(a^\dagger_{\vec{q}}a_{\vec{q}} + b^\dagger_{\vec{q}}b_{\vec{q}}\right) - J\sum_{\vec{q}}\gamma_{\vec{q}}\left(a^\dagger_{\vec{q}}b^\dagger_{\vec{q}} + a_{\vec{q}}b_{\vec{q}}\right) \tag{10}$$

hvor $\gamma_{\vec{q}} = 2(\cos q_x + \cos q_y)$ (når gitterkonstanten er satt lik en).

Vi foretar nå en Bogoliubov-transformasjon av operatorene $a_{\vec{q}}$ og $b_{\vec{q}}$. Vi definerer nye operatorer $A_{\vec{q}} = u_{\vec{q}}a_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}b^\dagger_{\vec{q}}$ og $B_{\vec{q}} = v_{\vec{q}}a^\dagger_{\vec{q}} + u_{\vec{q}}b_{\vec{q}}$. $u_{\vec{q}}$ og $v_{\vec{q}}$ er reelle funksjoner av $\vec{q}$.

f) Vis at hvis vi velger $u_{\vec{q}} = \cosh\theta$ og $v_{\vec{q}} = \sinh\theta$, er $A_{\vec{q}}$ og $B_{\vec{q}}$ boson-operatorer. Hva er fysikken bak Bogoliubov-transformasjonen?

g) Vis at når vi setter $\tanh 2\theta = \gamma_{\vec{q}}/2$, får Hamilton-operatoren den ønskede form

$$H = C + \sum_{\vec{q}}\omega_{\vec{q}}\left(A^\dagger_{\vec{q}}A_{\vec{q}} + B^\dagger_{\vec{q}}B_{\vec{q}}\right) \tag{11}$$

hvor C er en konstant og

$$\omega_{\vec{q}} = -2J\left(4 - \frac{\gamma^2_{\vec{q}}}{4}\right)^{1/2}. \tag{12}$$

(Hint: $\sinh^2\theta = (1/\sqrt{1-\tanh^2 2\theta} - 1)/2$.)

h) Hvordan oppfører dispersjonsrelasjonen $\omega_{\vec{q}}$ seg for små $\vec{q}$ — det vil si lange bølgelengder?

i) Dispersjonsrelasjonen for Heisenberg *ferro*magneter er

$$\omega_{\vec{q}} = J\,(4 - \gamma_{\vec{q}})\,. \tag{13}$$

Hvordan oppfører denne seg for små $\vec{q}$? Forklar kvalitativt forskjellen mellom de to dispersjonsrelasjonene (12) og (13) i denne grensen: Hva er fysikken bak forskjellen?

Magnetiseringen på undergitter A i antiferromagneten er gitt ved

$$M_A = \sum_{i\in A}\langle S^z_i\rangle = \frac{N_A}{2} - \sum_{\vec{q}}\langle a^\dagger_{\vec{q}}a_{\vec{q}}\rangle\,. \tag{14}$$

j) Hva er $\langle a^\dagger_{\vec{q}}a_{\vec{q}}\rangle$ ved temperatur T?

k) Finn temperaturavhengigheten av magnetiseringen M_A for lave T. Forklar kort approksimasjonene som gjøres.

<u>Oppgave 3</u>

Forklar *meget* kort hva som er de sentrale ideene bak BCS teorien.