Estructura de la Materia 2

Primer Cuatrimestre de 2021

Guía 8: Segunda Cuantización. Modelo de Hubbard.

1. Los operadores de creación y destrucción fermiónicos, cumplen las relaciones de anticonmutación

$$\left\{\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma'}\right\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}; \;\; \left\{\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}, \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma'}\right\} = 0; \;\; \{\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{i\sigma'}\} = 0.$$

   a) Muestre que $\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\left|i\sigma\right\rangle = 0$ donde el ket $\left|i\sigma\right\rangle$ corresponde a un espín σ en el sitio i.

   b) Dado el estado $\left|\Psi\right\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}_2}\left|0\right\rangle$, muestre explícitamente que la función de onda $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ es antisimétrica ante el intercambio $1 \leftrightarrow 2$.

2. En primera cuantización, los operadores de espín del electrón esta representados por las matrices de Pauli:

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\sigma, \;\; \sigma = \left\{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right\}.$$

   El operador en segunda cuantización se obtiene evaluando los elementos de matriz en índices de espín, para obtener:

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\sum_{\mu\mu'}\left\langle\mu\right|\mathbf{s}\left|\mu'\right\rangle \hat{c}^{\dagger}_{\mu}\hat{c}_{\mu'} = \frac{\hbar}{2}\sum_{\mu\mu'}\left\langle\mu\right|(\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)\left|\mu'\right\rangle \hat{c}^{\dagger}_{\mu}\hat{c}_{\mu'},$$

   con componentes

$$s^x = \frac{\hbar}{2}\left(\hat{c}^{\dagger}_{\downarrow}\hat{c}_{\uparrow} + \hat{c}^{\dagger}_{\uparrow}\hat{c}_{\downarrow}\right); \; s^y = i\frac{\hbar}{2}\left(\hat{c}^{\dagger}_{\downarrow}\hat{c}_{\uparrow} - \hat{c}^{\dagger}_{\uparrow}\hat{c}_{\downarrow}\right); \; s^z = \frac{\hbar}{2}\left(\hat{c}^{\dagger}_{\uparrow}\hat{c}_{\uparrow} - \hat{c}^{\dagger}_{\downarrow}\hat{c}_{\downarrow}\right).$$

   Usando las propiedades de conmutación de los operadores de creación y destrucción, compruebe que los operadores de espín definidos satisfagan las relaciones de conmutación de momento angular.

3. Para ganar intuición en la física del modelo de Hubbard, consideremos solo un sitio

$$H = U\hat{n}_{\uparrow}\hat{n}_{\downarrow}.$$

   En este caso sencillo el modelo se resuelve fácilmente. Tendremos cuatro autoestados $\{\left|0\right\rangle, \left|\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\right\rangle, \left|\uparrow\downarrow\right\rangle\}$ con autoenergías $0, 0, 0, U$ respectivamente.
   La función de partición gran canónica es

$$Z = \sum_{\alpha}\left\langle\alpha\right| e^{-\beta(H-\mu N)}\left|\alpha\right\rangle = 1 + 2e^{\beta\mu} + 2e^{2\beta\mu-\beta U}$$

   donde μ es el potencial químico, que controla el llenado. La energía, por otro lado es

$$E = \langle H\rangle = Z^{-1}\sum_{\alpha}\left\langle\alpha\right| He^{-\beta(H-\mu N)}\left|\alpha\right\rangle = \left(1 + 2e^{\beta\mu} + e^{2\beta\mu-\beta U}\right)Ue^{2\beta\mu-\beta U}.$$

a) Encuentre la expresión para la ocupación $\rho = \langle N \rangle$.

b) Realice un gráfico de ρ vs. μ para $U = 4$ y $T = 2$ (trabaje con $k_B \equiv 1$). ¿Cómo cambia la ocupación en función del potencial químico a esta temperatura? ¿Hay alguna característica destacada?

c) Repita los pasos del ítem anterior con $U = 4$ y $T = 0{,}5$. ¿Cambia algo? Explore otras temperaturas cercanas.

d) ¿Qué característica física del espectro refleja el comportamiento observado en el potencial químico? Este comportamiento es un indicador usual del "aislante de Mott".

e) Grafique el calor específico $\mathrm{d}E/\mathrm{d}T$. ¿Qué observa?

f) Veamos ahora las propiedades magnéticas. El momento magnético local, se define como

$$\left\langle m^2 \right\rangle = \left\langle (\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow)^2 \right\rangle .$$

Pruebe que el mismo se puede escribir como $\langle m^2 \rangle = \langle \hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow \rangle - 2d$, donde $d = \langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle$ es la "doble ocupación".

g) A llenado mitad, con $T = 2$, grafique el momento magnético local en función de U. Explique físicamente por qué $\langle m^2 \rangle = 1$ cuando U es grande. ¿Qué sucede con la doble ocupación?

h) A llenado mitad, con $U = 4$, grafique el momento magnético local en función de T. Explique físicamente por qué $\langle m^2 \rangle = 1/2$ cuanto T es grande.

4.

a) Demostrar que el Hamiltoniano de Hubbard

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}^\dagger_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$

conmuta con los siguientes operadores

$$\hat{n}_\uparrow = \sum_i \hat{n}_{i\uparrow};\ \hat{n}_\downarrow = \sum_i \hat{n}_{i\downarrow};\ \hat{s}^z = \sum_i \hat{s}^z_i .$$

¿Qué puede decir del espín total?

b) Calcular los autoestados y autoenergías para el caso de un **dímero**. Aproveche las simetrías demostradas y resuelva por bloques.

c) Para el sector de dos partículas:

1) ¿Cuánto vale el $\langle \hat{s}^z \rangle$ en el bloque con $\hat{n}_\uparrow = \hat{n}_\downarrow = 1$? Note que $\langle m^2 \rangle \propto \left\langle (\hat{s}^z)^2 \right\rangle$.
2) Calcule la diferencia de energía entre los estados $|\uparrow, \uparrow\rangle$ y $|\downarrow, \downarrow\rangle$ y el estado de menor energía del mismo bloque que el ítem anterior.
3) Analice el límite $U \gg t$. ¿Qué pasa con la función de onda del estado fundamental?