

Física de muchos cuerpos

DF-FCEN-UBA, Segundo Cuatrimestre 2020

Guía 5: Modelos tight-binding y de Hubbard

(1) Ejercicio 1.4 del libro de Bruus y Flensberg

En algunos cristales los electrones de valencia pueden estar ligados muy estrechamente a los iones del cristal. Un buen punto de partida para analizar dichos sistemas es describir la energía cinética a través de procesos de salto (“hopping”) con amplitud de probabilidad t de que un electrón de valencia salte de un sitio j a otro sitio vecino $j + \delta$. El correspondiente Hamiltoniano, llamado *tight binding*, está dado por:

$$H = -t \sum_{j\delta} c_{j+\delta}^\dagger c_j$$

(a) Considere una red 1D con N sitios, condiciones periódicas de contorno, y una constante de red a . En este caso tenemos $j = 1, 2, \dots, N$ y $\delta = \pm 1$. Use la transformada de Fourier discreta

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikja} c_k$$

para diagonalizar el Hamiltoniano en el espacio k y grafique los autovalores ε_k en función de k .

(b) En superconductores de alta temperatura los electrones de conducción están confinados a planos paralelos de CuO, en los que los iones forman una red 2D cuadrada. En este caso se puede aplicar el modelo *tight binding* en 2D. Generalice el modelo 1D a una red cuadrada 2D con parámetro de red a y grafique contornos (contours) de energía constante ε_{k_x, k_y} en el plano $k_x k_y$.

(2) Ejercicio sobre el modelo de Hubbard (por Liliana Arrachea, 2001)

Los metales de transición contienen electrones de conducción provenientes de orbitales tipo d , los cuales se caracterizan por estar localizados en torno a las posiciones de los iones. En este caso, la base de ondas planas resulta poco adecuada para la descripción

del sistema de electrones interactuantes y se utiliza, entonces, la base de funciones de Wannier $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, donde \mathbf{R}_i denota la posición del i-ésimo.

a) Escribir el Hamiltoniano del sistema de electrones interactuantes en segunda cuantización en la base de funciones de Wannier.

b) Realizar las simplificaciones necesarias para deducir el Hamiltoniano de Hubbard¹:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$

donde $\sigma = \uparrow, \downarrow$, mientras que $\langle ij \rangle$ denota pares de sitios primeros vecinos en la red y $h.c.$, el hermitico conjugado.

c) Considerar $U = 0$. Efectuar una transformación canónica que permita diagonalizar el término cinético (considerar condiciones de contorno periódicas). Escribir la expresión de la energía del estado fundamental E_0 para un sistema de N electrones en una red cúbica de N sitios. Considerar el límite continuo ($a \rightarrow 0$), siendo a la constante de red para los casos unidimensional y bidimensional. En el primer caso, completar el cálculo de E_0 . Dibujar la superficie de Fermi en ambos casos.

d) Escribir la expresión del término de interacción de H en la base del ítem (c).

e) Realizar una deducción análoga a la del ítem (b) para obtener un Hamiltoniano en el cual el alcance de interacción se extienda hasta sitios primeros vecinos.

(3) Ejercicio 9.1 del libro de Bruus y Flensberg

Un sistema fermiónico de dos orbitales. Considere un sistema físico que consiste de fermiones que pueden ocupar dos orbitales. El Hamiltoniano está dado por:

$$H = E_1 c_1^\dagger c_1 + E_2 c_2^\dagger c_2 + t c_1^\dagger c_2 + t^* c_2^\dagger c_1$$

Encuentre la función de Green retardada $G^R(ij, \omega)$, donde i y j pueden ser 1 o 2, y donde $G^R(ij, t - t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_i(t), c_j^\dagger(t')\} \rangle$. Use el método de la ecuación de movimiento. No se olvide de interpretar el resultado.

¹Bibliografía: G. Mahan “*Many-Particle Physics*,” P. W. Anderson “*Concepts in Solids*” y/o referencias allí citadas