PGF5295 - Teoria Quântica de Muitos Corpos em Matéria Condensada

Lista de exercícios 3 - 1s/2013 (entrega em 23/05/2013)

1. Sendo $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ com $[\hat{H}_1,\hat{H}_2] = 0$ e sendo que cada Hamiltoniano H_i envolve apenas operadores $c_{i\nu}$ e $c^\dagger_{i\nu}$, mostre que vale a propriedade:

$$\left\langle c^\dagger_{2\mu}(t) c^\dagger_{1\nu}(t) c_{1\nu'}(t') c_{2\mu'}(t') \right\rangle = \left\langle c^\dagger_{2\mu}(t) c_{2\mu'}(t') \right\rangle \left\langle c^\dagger_{1\nu}(t) c_{1\nu'}(t') \right\rangle$$

onde os operadores $c_{i\nu}(t)$ estão escritos na representação de Heisenberg.

Sugestões:

1) Utilize a seguinte versão da fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff: $e^{\hat{X}+\hat{Y}+\frac{1}{2}[\hat{X},\hat{Y}]} = e^{\hat{X}}.e^{\hat{Y}}$ se $[\hat{X},\hat{Y}] = c$ onde c é um escalar.

2) Use o fato que, no caso de partículas independentes, os auto-estados de muitos corpos podem ser escritos como produtos de estado de um corpo na base de números de ocupação.

2. Considere o termo da impureza no modelo de Anderson:

$$H_d = \sum_\sigma \varepsilon_d \hat{n}_{d\sigma} + U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow} \ ,$$

$(\hat{n}_{d\sigma} \equiv c^\dagger_{d\sigma} c_{d\sigma})$

(a) Mostre que H_d pode ser escrito na forma:

$$H_d = \sum_\sigma \left(\varepsilon_d + \frac{U}{2} \right) \hat{n}_{d\sigma} + \frac{U}{2} \left(\sum_\sigma \hat{n}_{d\sigma} - 1 \right)^2 - \frac{U}{2} \ .$$

Sugestão: use o fato de que, para férmions, $(\hat{n}_{d\sigma})^2 = \hat{n}_{d\sigma}$

Definimos a *transformação partícula-buraco* $c^\dagger_{d\sigma} \leftrightarrow h^\dagger_{d\sigma}$ onde $h^\dagger_{d\sigma} \equiv c_{d\bar{\sigma}}$ é um operador fermiônico que cria um "buraco" de spin σ (equivalente a destruir um elétron de spin oposto $\bar{\sigma}$).

(b) Mostre que $\sum_\sigma h^\dagger_{d\sigma} h_{d\sigma} = \sum_\sigma (1 - \hat{n}_{d\sigma})$.

(c) Mostre que H_d permanece invariante sobre uma transformação particula-buraco somente se $\varepsilon_d = -U/2$. Esse é o chamado *ponto de simetria partícula-buraco*.

3. Mostramos em aula que a equação de movimento para a função de Green retardada da impureza no modelo de Anderson $G_{d\sigma}(\omega) = \langle\langle c_{d\sigma} : c^\dagger_{d\sigma} \rangle\rangle$ não "fecha"para $U \neq 0$.

(a) Refaça essa conta e mostre que $G_{d\sigma}(\omega)$ pode ser escrita na forma:

$$G_{d\sigma}(\omega) = G^{(0)}_{d\sigma}(\omega) + U G^{(0)}_{d\sigma}(\omega) D_{\bar{\sigma}\sigma}(\omega) \ .$$

onde $G^{(0)}_{d\sigma}(\omega)$ é a função de Green para $U = 0$ e $D_{\bar{\sigma}\sigma}(\omega) = \langle\langle \hat{n}_{d\bar{\sigma}} c_{d\sigma} : c^\dagger_{d\sigma} \rangle\rangle$.

(b) Calcule a equação de movimento para $D_{\bar{\sigma}\sigma}(\omega)$ e mostre que aparecem outras funções de correlação com termos de ordem maior em U.

4. Considere uma impureza de Anderson conectada a contatos à esquerda (L) e à direita (R): $H = H_d + H_{\text{coup}} + \sum_{\ell(=L,R)\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\ell\mathbf{k}} \hat{n}_{\ell\mathbf{k}\sigma}$ onde

$$H_{\text{coup}} = \sum_{\ell(=L,R)\mathbf{k}\sigma} V c^\dagger_{d\sigma} c_{\ell\mathbf{k}\sigma} + V^* c^\dagger_{\ell\mathbf{k}\sigma} c_{d\sigma} \ .$$

Aqui assumimos que os acoplamentos são iguais ($V = V_R = V_L$).

(a) Mostre que a impureza só se acopla com a combinação *simétrica* de operadores fermiônicos dos contatos. Ou seja, que H_{coup} pode ser reescrito na forma:

$$H_{\text{coup}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_S c^\dagger_{d\sigma} c_{S\mathbf{k}\sigma} + V^*_S c^\dagger_{S\mathbf{k}\sigma} c_{d\sigma}$$

onde $c_{S\mathbf{k}\sigma} = (\sqrt{2})^{-1} (c_{L\mathbf{k}\sigma} + c_{R\mathbf{k}\sigma})$ e $V_S = \sqrt{2} V$.

(b) Definindo o operador "corrente que sai"do contato ℓ

$$I_{\ell(=L,R)} = \frac{d}{dt} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{\ell\mathbf{k}\sigma} \ ,$$

escreva as equações de movimento para $\hat{n}_{\ell\mathbf{k}\sigma}$ e mostre que a corrente de L para R dada por $I = \frac{1}{2}(I_L - I_R)$ envolve apenas um acoplamento da impureza com a combinação *assimétrica* $c_{A\mathbf{k}\sigma} = (\sqrt{2})^{-1} (c_{L\mathbf{k}\sigma} - c_{R\mathbf{k}\sigma})$.