Física de la materia condensada

Hoja 4

Ejercicio 1: Excitaciones colectivas
Tomando el límite $|\vec{q}| \to 0$ de la susceptibilidad de Lindhard, mostrar que la función dieléctrica en la aproximación de fase aleatoria (RPA) tiene la forma: $\epsilon_{\mathrm{RPA}}(\omega) \approx 1 - \omega_{\mathrm{p}}^2/\omega^2$, donde ω_{p} es la frecuencia de oscilación del plasma. Discutir si es posible una excitación del sistema en ese régimen, aunque $\mathrm{Im}\chi_0(q,\omega) = 0$.

Ejercicio 2: Estados de Wannier
Los estados de Wannier $|j,n\rangle$ describen estados n localizados en las posiciones $\vec{R}_j$ de una red cristalina. Se pueden escribir de la forma:

$$\langle\vec{r}|j,n\rangle = \mathcal{W}_n(\vec{r}-\vec{R}_j) = \mathcal{N}^{-1/2}\sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\vec{R}_j}\psi_n(\vec{k},\vec{r}), \tag{1}$$

en función de las funciones de onda $\psi_n(\vec{k},\vec{r})$, donde $\mathcal{N}$ es el número de celdas del sistema. Mostrar que las funciones de Wannier forman una base ortogonal. Escribir el término cinético del hamiltoniano del gas de electrones no interactuante en dicha base (en segunda cuantización, claro).

Ejercicio 3: Dímero de Hubbard
Dado el hamiltoniano de Hubbard para dos sitios:

$$\hat{H} = -\tau\sum_{\sigma}\left(\hat{c}^{\dagger}_{1\sigma}\hat{c}_{2\sigma} + \hat{c}^{\dagger}_{2\sigma}\hat{c}_{2\sigma}\right) + U\sum_{i=1}^{2}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} \tag{2}$$

a medio llenado, considerando que los dos electrones tienen spin opuesto (es decir, en el sector $\hat{S}^z_{\mathrm{tot}}$=0),

i) obtener sus autoestados y autovalores (ayuda: emplear la base de autoestados del spin total, $\hat{S}$);
ii) comprobar que el estado de más baja energía es un singlete que se puede expresar de la forma;

$$|\psi_0\rangle = A\left[|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle + \beta\left(|0,\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow,0\rangle\right)\right], \tag{3}$$

encontrando la constante de normalización A y β;
iii) en el límite $U \gg \tau$ (electrones localizados), demostrar (y comprobar usando teoría de perturbaciones) que la diferencia de energías entre el singlete y el triplete es $J = 4\tau^2/U$, dando lugar a una interacción antiferromagnética;
iv) demostrar que en ese mismo límite, $\beta \to 0$, con lo que el estado fundamental se reduce a:

$$|\psi_0\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right); \tag{4}$$

v) comparar las energías de los estados en los dos límites: $U \gg \tau$ (electrones localizados) vs. $\tau \gg U$ (fuertes fluctuaciones de carga);
vi) estimar el valor crítico de $\alpha = U/\tau$ en el cual se pasa de un régimen a otro, representar gráficamente las energías de las dos soluciones frente a α y comparar con la solución exacta obtenida en el primer apartado.