



UNIVERSITÀ DI TRIESTE

A.A. 2021/2022

# Modello di Hubbard con interazione on-site dipendente dal sito

LEONARDO CRUCIANI

February 12, 2022

# Introduzione

Mantengo le principali approssimazioni dell'Hubbard:

- Hopping solo a primi vicini:  $T_{ij} \neq 0$  solo se  $j = i \pm 1$ .
- Interazione solo on-site:  $V_{ijkl} \neq 0$  solo se  $i = j = k = l$ .

Tuttavia, a differenza dell'Hubbard tradizionale in cui l'interazione ha la stessa intensità su tutti i siti,  $V_i = V, \forall i = 1, \dots, L$ , considero un'interazione che dipende dal sito.

In particolare posso considerare un sistema composto da tre regioni, le due esterne in cui l'interazione dominante è quella fononica (attrattiva,  $V < 0$ ) e una interna in cui è dominante un'interazione di tipo coulombiano (repulsiva,  $V > 0$ ). E' noto che per  $V = 0$  l'Hubbard è un metallo, mentre esibisce comportamenti da superconduttore per certi  $V < 0$ .

L'obiettivo è tentare di rappresentare una Josephson Junction lineare di tipo SNS utilizzando un potenziale  $V$  dipendente dal sito.

## 1 Mean field

L'hamiltoniana considerata è dunque la seguente :

$$H = H_0 + H_I = -T \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) - \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}. \quad (1)$$

**Nota:** questa Hamiltoniana conserva il numero di elettroni totali  $N_c = N_\uparrow + N_\downarrow$ .

Applico l'approssimazione di campo medio:

$$\bar{H}_I = \sum_{i=1}^L V_i \left( \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - \langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \right). \quad (2)$$

Definisco le densità  $n_{i\sigma}$  e le coppie di Cooper  $\Delta_i$ :

$$\Delta_i := -\langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \rangle, \quad \Delta_i^* := \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle, \quad n_{i\uparrow} := \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle, \quad n_{i\downarrow} := \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle. \quad (3)$$

Dunque:

$$\bar{H}_I = \sum_{i=1}^L V_i \left( n_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + n_{i\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + \Delta_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - \Delta_i^* c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \right). \quad (4)$$

Per ricondirmi ad una forma più maneggevole di  $H$ , applico una trasformazione *particle-hole* sugli orbitali down ( $\downarrow$ ), e li scrivo tramite un apposito vettore  $\mathbf{d}$ .

$$(c_{1\uparrow}, \dots, c_{L\uparrow}, \dots, c_{1\downarrow}^\dagger, \dots, c_{L\downarrow}^\dagger) \mapsto (d_1, \dots, d_{2L}) =: \mathbf{d} \quad (5)$$

Nel dettaglio:

$$\begin{cases} c_{i\uparrow}^\dagger = d_i^\dagger, \\ c_{i\downarrow}^\dagger = d_{i+L}, \end{cases} \quad \begin{cases} c_{i\uparrow} = d_i, \\ c_{i\downarrow} = d_{i+L}^\dagger. \end{cases} \quad (6)$$

I termini di hopping trasformano nel modo seguente:

$$\begin{cases} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1\uparrow} = d_i^\dagger d_{i+1}, \\ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1\downarrow} = d_{i+L+1}^\dagger d_{i+L} = -d_{i+L}^\dagger d_{i+L+1}. \end{cases} \quad (7)$$

E i termini interagenti così :

$$\begin{cases} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger = d_i^\dagger d_{i+L}, \\ c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} = d_i d_{i+L}^\dagger = -d_{i+L}^\dagger d_i, \\ c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} = d_i^\dagger d_i, \\ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} = d_{i+L} d_{i+L}^\dagger = 1 - d_{i+L}^\dagger d_{i+L}. \end{cases} \quad (8)$$

Per cui, il vuoto dei  $c$  risulta:

$$|0\rangle_c = \prod_{i=L}^{2L} d_i^\dagger |0\rangle_d. \quad (9)$$

E i parametri *mean field*, con  $\mathbf{n} := (n_1, \dots, n_{2L}) = (n_{1\uparrow}, \dots, n_{L\uparrow}, \dots, n_{1\downarrow}, \dots, n_{L\downarrow})$ , risultano:

$$\Delta_i := \langle d_{i+L}^\dagger d_i \rangle, \quad \Delta_i^* := \langle d_i^\dagger d_{i+L} \rangle, \quad n_i := \begin{cases} \langle d_i^\dagger d_i \rangle, & i \leq L \\ 1 - \langle d_{i+L}^\dagger d_{i+L} \rangle, & i > L \end{cases} \quad (10)$$

L'Hamiltoniana mean field risulta quindi *non interagente nelle particelle d*:

$$\begin{aligned} H = & T \sum_{i=1}^L \left( -d_i^\dagger d_{i+1} + d_{i+L}^\dagger d_{i+L+1} + h.c. \right) + \\ & + \sum_{i=1}^L V_i \left( n_{i+L} d_i^\dagger d_i - n_i d_{i+L}^\dagger d_{i+L} + \Delta_i d_i^\dagger d_{i+L} + \Delta_i^* d_{i+L}^\dagger d_i \right) + \sum_{i=1}^L V_i n_i^{cost} \end{aligned} \quad (11)$$

**Nota:** Questa hamiltoniana conserva il numero di particelle  $d$ , cioè la quantità:

$$N = N_d = \sum_{i=1}^{2L} \langle d_i^\dagger d_i \rangle = \sum_{i=1}^L (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} + 1) = N_\uparrow - N_\downarrow + L \quad (12)$$

In particolare, la scelta  $N_d = L$  equivale a imporre una presenza bilanciata di particelle up e down,  $N_\uparrow = N_\downarrow$ . L'Hamiltoniana può essere rappresentata per mezzo di una matrice hermitiana  $2L \times 2L$ ,  $\mathcal{E}$ :

$$H = \mathbf{d}^\dagger \mathcal{E} \mathbf{d}, \quad \mathcal{E} = \begin{pmatrix} A & C^\dagger \\ C & B \end{pmatrix}, \quad (13)$$

Dove il blocco  $A$  ha i termini  $-V_i n_{L+i}$  sulla diagonale principale e  $-T$  sugli incroci consecutivi:

$$A = \begin{pmatrix} V_1 n_{L+1} & -T & 0 & \dots & 0 & -T \\ -T & V_2 n_{L+2} & -T & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -T & V_3 n_{L+3} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & V_{L-1} n_{2L-1} & -T \\ -T & 0 & 0 & \dots & -T & V_L n_{2L} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Il blocco  $B$  è analogo, con i  $V_{i-L} n_i$  sulla diagonale (qui  $i = L, \dots, 2L$ ) e  $T$  sugli incroci consecutivi.

$$B = \begin{pmatrix} -V_1 n_1 & T & 0 & \dots & 0 & T \\ T & -V_2 n_2 & T & \dots & 0 & 0 \\ 0 & T & -V_3 n_3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -V_{L-1} n_{L-1} & T \\ T & 0 & 0 & \dots & T & -V_L n_L \end{pmatrix}. \quad (15)$$

**Nota:** Le  $T$  sui vertici secondari equivalgono all'imposizione delle *periodic boundary conditions*. Rimuovendole si trova invece il sistema finito. Infine, il blocco  $C$  è diagonale:

$$C = \text{diag}(V_1 \Delta_1, \dots, V_L \Delta_L). \quad (16)$$

**Esempio L=2:** Nel caso semplice in cui  $L = 2$ , si ha:

$$\mathcal{E} = \begin{pmatrix} V_1 n_3 & -T & V_1 \Delta_1^* & 0 \\ -T & V_2 n_4 & 0 & V_2 \Delta_2^* \\ V_1 \Delta_1 & 0 & -V_1 n_1 & T \\ 0 & V_2 \Delta_2 & T & -V_2 n_2 \end{pmatrix} \quad (17)$$

**Nota:** Al crescere di  $L$  la frazione di celle occupate cala drasticamente, e  $\mathcal{E}$  può essere considerata a tutti gli effetti una matrice sparsa.

Trattandosi di una matrice hermitiana,  $\mathcal{E}$  è sempre diagonalizzabile e possiede autovalori tutti reali. Sia  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{2L}) = U \mathcal{E} U^\dagger$  la matrice degli autovalori ordinati in maniera crescente,  $U$  la matrice unitaria degli autovettori e  $\mathbf{a} = U \mathbf{d}$  il vettore ottenuto dall'applicazione di  $U$  a  $\mathbf{d}$ . Allora:

$$H = \mathbf{d}^\dagger \mathcal{E} \mathbf{d} = \mathbf{d}^\dagger U^\dagger U \mathcal{E} U^\dagger U \mathbf{d} = \mathbf{a}^\dagger \Lambda \mathbf{a} = \sum_{k=1}^{2L} \lambda_k a_k^\dagger a_k, \quad (18)$$

cioè  $H$  è diagonale negli operatori:

$$a_i = \sum_{j=1}^{2L} U_{ij} d_j, \quad (19)$$

**Regole di commutazione degli  $a_k$ :** Gli operatori  $c_{i\sigma}$  sono fermionici, perciò soddisfano:

$$\left\{ c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\tau} \right\} = \left\{ c_{i\sigma}, c_{j\tau}^\dagger \right\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\tau}, \quad \left\{ c_{i\sigma}, c_{j\tau} \right\} = \left\{ c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\tau}^\dagger \right\} = 0. \quad (20)$$

Trattandosi di due trasformazioni unitarie le regole di commutazione per gli  $a_k$  devono essere fermioniche:

$$\left\{ a_k, a_l^\dagger \right\} = \sum_j U_{jk} U_{jl}^* = \delta_{kl}. \quad (21)$$

**Autostati:** In approssimazione Hartee-Fock l'autostato di ground state  $|\psi\rangle$  sarà dato dalla produttoria degli orbitali  $a_k^\dagger$  per la quale l'energia è minima. Dunque nel caso di  $N_d$  particelle  $d$ , a causa dell'ordinamento scelto per i  $\lambda_k$ , gli stati occupati saranno i primi  $N_d$ .

$$|\psi\rangle = \prod_{k=1}^N a_k^\dagger |0\rangle. \quad (22)$$

L'energia di ground state risulta dunque:

$$E_{gs} = \sum_{k=1}^N \lambda_k + \sum_{i=1}^L V_i n_i. \quad (23)$$

**Nota:** Riscrivendo questi stati in termini dei  $c_{i\sigma}$  con il vuoto opportuno ottengo i consueti **stati BCS**.

## 2 Equazioni di autoconsistenza

Invertiamo la (19) per ottenere i  $d_j$  in termini degli  $a_i$ :

$$\mathbf{d} = U^\dagger \mathbf{a}, \quad d_j = \sum_{i=1}^{2L} U_{ij}^* a_i, \quad (24)$$

Calcoliamo le espressioni dei parametri mean field in termini degli  $U_{ij}$ . Per i  $\Delta_i$ :

$$\begin{aligned} \Delta_i &= \langle d_{i+L}^\dagger d_i \rangle = \left\langle 0 \left| \prod_{j=1}^N a_j \sum_{l=1}^{2L} U_{l,i+L} a_l^\dagger \sum_{m=1}^{2L} U_{mi}^* a_m \prod_{k=1}^N a_k^\dagger \right| 0 \right\rangle = \\ &= \sum_{l=1}^{2L} U_{l,i+L} \sum_{m=1}^{2L} U_{mi}^* \left\langle 0 \left| \prod_{j=1}^N a_j a_l^\dagger a_m \prod_{k=1}^N a_k^\dagger \right| 0 \right\rangle = \\ &= \sum_{l=1}^{2L} U_{l,i+L} \sum_{m=1}^{2L} U_{mi}^* \sum_{k=1}^N \delta_{kl} \delta_{km} = \sum_{k=1}^N U_{k,i+L} U_{ki}^*. \end{aligned} \quad (25)$$

Analogamente:

$$n_i = \begin{cases} \langle d_i^\dagger d_i \rangle & = \sum_{k=1}^N U_{ki} U_{ki}^*, & i \leq L \\ 1 - \langle d_{i+L}^\dagger d_{i+L} \rangle & = 1 - \sum_{k=1}^N U_{k,i+L} U_{k,i+L}^*, & i > L. \end{cases} \quad (26)$$

## 3 Implementazione

1. Genero random i parametri  $\Delta_k, n_k$ .
2. Usando i parametri  $\Delta_k, n_k$  scrivo la matrice  $\mathcal{E}$ .
3. Diagonalizzo  $\mathcal{E}$  e trovo i  $\lambda_i$  e gli  $U_{ij}$ .
4. Determino i parametri mean field  $\Delta'_k, n'_{k\sigma}$  indotti dalle  $U_{ij}$  trovate, usando la (25) e la (26).
5. Se li trovo uguali, a meno di un errore  $\varepsilon \sim 10^{-3}$ , a quelli della run precedente, ho terminato.
6. Altrimenti ridefinisco  $n_{l\sigma} := (1 - dt) n_{l\sigma} + dt n'_{l\sigma}$ , e similmente con i  $\Delta$ , con  $dt = 10^{-2}$ , e reitero 2-6.

## 4 Risultati numerici

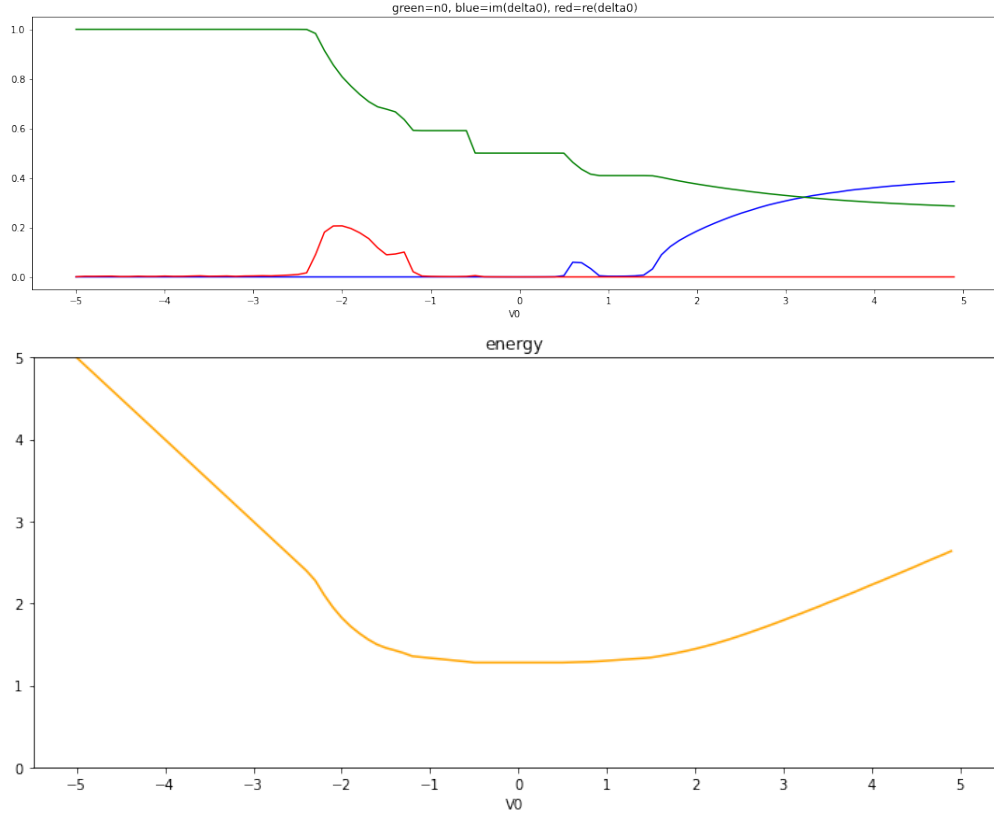
**Potenziali omogenei:** con  $N = L = 22$ . I valori di  $n_{\uparrow}$  e  $n_{\downarrow}$  risultano uguali e costanti. I valori di  $\Delta$  risultano anch'essi costanti.

$$\begin{array}{c}
 V_0 \\
 T \\
 n \\
 \Delta \\
 -E_{gs}/L
 \end{array}
 \left\| \begin{array}{c|c|c|c|c|c|c|c}
 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 2 & -2 \\
 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 0.25 & 1 & 0.5 & 0.41 & 0.59 & 0.38 & 0.81 \\
 0.43i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.18i & 0.21 \\
 0.5 & 1 & 1.28 & 1.30 & 1.33 & 1.44 & 1.82
 \end{array} \right. \quad (27)$$

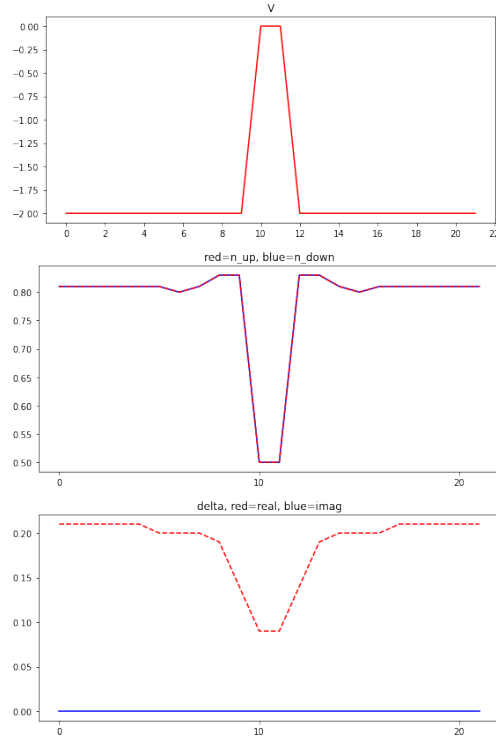
- Prendendo  $N = L = 222$ , i valori a cui convergono  $n$  e  $\Delta$  sono gli stessi per  $N = 22$ , tranne nei casi  $(1, 1)$ ,  $(-1, 1)$  e  $(2, 1)$  in cui c'è una piccola differenza (ordine di  $10^{-2}$ ).
- Prendendo  $N = L = 40$ , solo nel caso  $(0, 1)$ , si hanno gli  $n$  oscillanti ( $0.48 \sim 0.52$ ) attorno al valore ottenuto per  $N = 22$ . Questo comportamento è dovuto alla degenerazione del ground state nella condizione di *close shell*.
- Con  $N=L=23$  ancora ci sono piccole differenze (ordine di  $10^{-2}$ ).

**Sweep** tra  $V_0 = -5$  e  $V_0 = +5$ , con passo  $dV_0 = 0.1$ ,  $T = 1$  e  $N = 22$ .

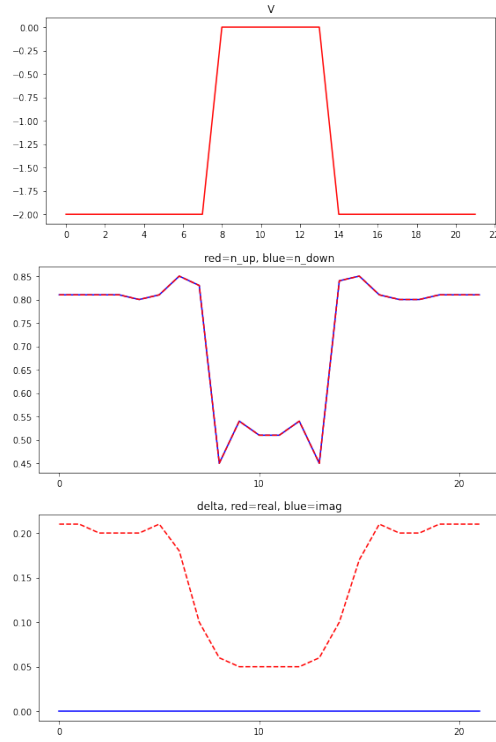
Per ogni valore di  $V_0$ , i valori alla convergenza di  $n$  e  $\Delta$  sono costanti rispetto ai siti, ne riporto il valore, al variare di  $V_0$  nell'intervallo  $[-5, +5]$ :



**Potenziale a barriera:**  $V_0 = -2, V_b = 0, L = N = 22, A = 2.$



**Potenziale a barriera:**  $V_0 = -2, V_b = 0, L = N = 22, A = 4.$



## 5 Conclusioni

### 5.1 Confronto con la teoria

Consideriamo i valori teorici nei casi limite e confrontiamoli con quelli ottenuti numericamente.

**Caso  $T = 0$**  : Gli stati singolarmente occupati o vuoti sono autostati di  $H_I = \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$  con autovalore 0:

$$\begin{aligned} H_I |0\rangle &= \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} |0\rangle = 0 \\ H_I c_{j\sigma}^\dagger |0\rangle &= \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\sigma}^\dagger |0\rangle = \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger (\delta_{ij} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{j\sigma}^\dagger c_{i\downarrow}) |0\rangle = \\ &= \delta_{\sigma\downarrow} V_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle = -\delta_{\sigma\downarrow} V_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} |0\rangle = 0 \end{aligned} \quad (28)$$

Lo stato con un sito  $j$  doppio occupato  $|\psi_j\rangle = c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle$  è autostato con autovalore  $V_j$  di  $H_I$ :

$$\begin{aligned} H_I |\psi_j\rangle &= \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle = - \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle = \\ &= - \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger (\delta_{ij} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}) |0\rangle = -V_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle = \\ &= V_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow} |0\rangle = V_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger (1 - c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}) |0\rangle = V_j |\psi_j\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

**Nota:** Infatti  $H_I$  è un'Hamiltoniana *bosonica* (anche se  $\psi_i^2 = 0$ ) diagonale, definiti gli operatori di creazione e distruzione coppia:

$$\psi_i = c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}, \quad \psi_i^\dagger = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \quad (30)$$

Si ha:

$$H_I = - \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} = \sum_{i=1}^L V_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} = \sum_{i=1}^L V_i \psi_i^\dagger \psi_i. \quad (31)$$

Pertanto,  $H_I$  rende favorita la doppia occupazione rispetto alla singola o al vuoto se  $V_i < 0$  attrattivo, e sfavorita se  $V_i > 0$  repulsivo:

- Ci aspettiamo dunque che per  $V_i < 0$  il ground state sia quello con tutti i siti doppiamente occupati, cioè  $|\psi_{gs}\rangle = |\psi_1 \dots \psi_L\rangle$ . Consistentemente, il valore numerico ottenuto (sia per  $V_i = V_0 = -1$ , che per potenziali negativi non omogenei) è  $n = 1$ . Inoltre è stato verificato che il valore teorico dell'energia di ground state, trovato usando la (31). Il valore è calcolato a meno di una costante addittiva  $\sum_{i=1}^L V_i n_i$ :

$$E_{gs} = \langle \psi_{gs} | \bar{H}_I | \psi_{gs} \rangle = \sum_{i=1}^L V_i. \quad (32)$$

Coincide con quello numerico:

$$E_{gs} = \sum_{i=1}^N \lambda_i, \quad (33)$$

anche per potenziali non omogenei (sempre nella condizione  $T = 0$ ).



- Viceversa per  $V_i = V_0 = 1$  il ground state non conterrà nessun doppio occupato. Esistono  $3^L$  stati che soddisfano questa proprietà. Nel caso limite di tutti siti vuoti, si ha  $n = 0$ , in quello di tutti gli stati singolarmente occupati, si ha  $n = 0.5$ . Pertanto ci si aspetta  $0 \leq n \leq 0.5$ . La distribuzione non è uniforme: il caso tutti siti vuoti ( $n = 0$ ) è non-degenere, mentre quello con tutti i siti singolarmente occupati ( $n = 0.5$ ) è  $2^L$  volte degenere.

Assumendo che ogni stato microscopico di GS abbia uguale probabilità, la probabilità di avere un GS con  $m$  particelle è:

$$p(m) = 2^m 3^{-L} \frac{L!}{m!(L-m)!}, \quad n = \frac{m}{2L}. \quad (34)$$

Il massimo di questa distribuzione è circa  $m = \frac{2}{3}L$ . Pertanto i valori più comuni di  $n$  dovrebbero trovarsi attorno a  $n = 0.33$ .

Tuttavia dopo circa  $3^L$  run del codice (con un  $L$  minore, pari a 6, e valori iniziali generati casualmente con seed variabili) il risultato è sempre stato  $n = 0.25$ .

**Con l'Hamiltoniana mean field** Consideriamo il caso  $L = 2$ , prendiamo  $V_i = 1$ ,  $T = 0$  e imponiamo che gli  $n$  e  $i\Delta$  siano costanti nei due siti:

$$\mathcal{E} = \begin{pmatrix} n & 0 & \Delta^* & 0 \\ 0 & n & 0 & \Delta^* \\ \Delta & 0 & -n & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & -n \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} n & \Delta^* \\ \Delta & -n \end{pmatrix} \Rightarrow E_- = -2\sqrt{n^2 + |\Delta|^2} \quad (35)$$

Fissata l'energia di ground state a  $E_- = -L/2$  (cioè quella che si ottiene numericamente), tutte le configurazioni dove  $n$  e  $|\Delta|$  giacciono sul cerchio di raggio 0.5 sono equivalenti:

$$n_i = \frac{1}{2} \cos \theta, \quad \Delta_i = \frac{1}{2} e^{i\varphi} \sin \theta. \quad (36)$$

Numericamente si vede che ciò avviene anche quando  $L = 22$ . Ad esempio

$n$	0	0.25	0.35	0.40	0.5
$\Delta$	0.5i	0.43i	0.35	0.28 + 0.08i	0
$E$	-11	-11	-11	-11	-11

(37)

Il programma converge sempre a  $\theta = 60^\circ$  e  $\phi = 90^\circ$ .

**Caso  $V_0 = 0, T = 1$**  L'Hamiltoniana  $H_0$  può essere diagonalizzata con la trasformata di Fourier:

$$c_{j\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=1}^L e^{ijk} c_{k\sigma}^\dagger, \quad H_0 = -2T \sum_{k=1}^L \cos(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad H_0 c_{k\sigma}^\dagger |0\rangle = -2T \cos(k) c_{k\sigma}^\dagger |0\rangle. \quad (38)$$

In 1D troviamo dunque una struttura con una singola banda  $E_k = -2T \cos(k)$ .

Il ground state sarà dato dallo stato che riempie i valori di  $k$  per cui  $E_k$  è negativa, cioè  $-\pi/2 < k \leq \pi/2$ . In altre parole, verrà riempita mezza zona di Brillouin, per cui  $n = 0.5$ , in accordo con i risultati numerici.

## 5.2 Coppie di Cooper

Nel caso di potenziale a barriera, è stato utilizzato il potenziale  $V_0 = -2$  che dal grafico 4 sappiamo essere quello più adatto alla creazione di coppie di Cooper reali.

Per la barriera si è scelto il caso in cui l'Hubbard è un metallo,  $V_b = 0$ .

Si osserva che alcune coppie di Cooper sopravvivono anche all'interno della barriera.

Assumendo un errore massimo di  $10^{-2}$  il valore limite di larghezza della barriera per cui ciò avviene è di  $A = 4$  siti su  $L = 22$  totali.

### 5.3 Conservazione di $N_\sigma$

A partire dai valori generati inizialmente per gli  $n$  posso ottenere dei valori  $N_\uparrow$  e  $N_\downarrow$ , tuttavia questi valori non sono fissati, infatti se il metodo va a convergenza questa non deve dipendere dai valori iniziali dei parametri.

In particolare, dato  $L$ , fissando  $N = N_d = N_\uparrow - N_\downarrow + L$  come richiesto dalla trasformazione *particle hole sui down*, sto definendo lo *squilibrio* tra le particelle up e quelle down. Il caso  $N = L$  equivale a imporre una presenza equa delle due specie.

Ma se i delta sono nulli, e quindi  $[H, N_c] = 0$ , posso fissare anche  $N_c$ ? No, perché sono linearmente indipendenti ( $N_d = N_\uparrow - N_\downarrow + L$  e  $N_c = N_\uparrow - N_\downarrow$ ) e dunque fissarli entrambi singolarmente sarebbe equivalente a fissare  $N_\uparrow$  e  $N_\downarrow$  singolarmente, che sappiamo già non essere possibile.

In altre parole, il mean field è autoconsistente quando ci sono valori di  $n$ , e dunque di  $N_\uparrow$  e  $N_\downarrow$  specifici, definiti dal modello mean field.

In conclusione, se volessi fissare i parametri  $N_\uparrow$  e  $N_\downarrow$  singolarmente, non potrei usare un approccio autoconsistente (cioè fare il mean field) perché questo comunque dovrebbe convergere a valori dati dal modello, ciò vale anche se l'hamiltoniana conserva singolarmente  $N_\uparrow$  e  $N_\downarrow$  (cioè se  $\Delta = 0$ ) perché è dovuto al metodo, non ad H.

Io fisso la differenza  $N_d$ , il mean field fissa la somma  $N_c$ .