

格子比熱

格子振動のエネルギー

$$U = \sum_{\mathbf{K}} \sum_p U_{\mathbf{K},p} = \sum_{\mathbf{K}} \sum_p \langle n_{\mathbf{K},p} \rangle \hbar \omega_{\mathbf{K},p}$$

p : モードの種類 (縦波LA, 横波TA)

$\langle n_{\mathbf{K},p} \rangle$: フォノンの数

$$\begin{aligned} \langle n_{\mathbf{K},p} \rangle &= \frac{\sum_n n \exp(-n \hbar \omega_{\mathbf{K},p} / k_B T)}{\sum_{n'} \exp(-n' \hbar \omega_{\mathbf{K},p} / k_B T)} \\ &= \frac{x}{1-x} = \frac{1}{\exp(\hbar \omega_{\mathbf{K},p} / k_B T) - 1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_n \exp(-na) &= \sum_n x^n = \frac{1}{1-x} = \frac{1}{1-\exp(-a)} \\ \sum_n n \exp(-na) &= \sum_n n x^n = x \frac{d}{dx} \sum_n x^n = x \frac{d}{dx} \frac{1}{1-x} \\ &= \frac{\exp(-a)}{(1-\exp(-a))^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\mathbf{K}} \sum_p \frac{\hbar \omega_{\mathbf{K},p}}{\exp(\hbar \omega_{\mathbf{K},p} / k_B T) - 1} \\ &= \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{\hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1} \end{aligned}$$

デバイ模型 $\omega = vK$ 音響フォノン

$$D(\omega) = \frac{V \omega^2}{2\pi^2 v^3} \quad C_{\text{phonon}} \propto T^3$$

Lattice specific heat

$$C_{\text{phonon}} = k_B \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{(\hbar \omega / k_B T)^2 \exp(\hbar \omega / k_B T)}{(\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1)^2}$$

第二量子化の概念

フェルミ粒子の生成消滅演算子 c^*, c

真空状態 $|0\rangle$ にスピン σ の電子を座標 R_i に生成 $\rightarrow c_{i\sigma}^* |0\rangle : \Psi(\mathbf{r}_1) = \varphi(\mathbf{r}_1 - R_i)$

真空状態 $|0\rangle$ にスピン σ の電子を R_i と R_j に生成

$$\rightarrow c_{j\sigma}^* c_{i\sigma}^* |0\rangle : \Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(\mathbf{r}_1 - R_i) \varphi(\mathbf{r}_2 - R_j) - \varphi(\mathbf{r}_2 - R_i) \varphi(\mathbf{r}_1 - R_j)]$$

$\downarrow i$ と j を交換

$\downarrow i$ と j を交換

$$c_{i\sigma}^* c_{j\sigma}^* |0\rangle : \Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(\mathbf{r}_1 - R_j) \varphi(\mathbf{r}_2 - R_i) - \varphi(\mathbf{r}_2 - R_j) \varphi(\mathbf{r}_1 - R_i)]$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow c_{i\sigma}^* c_{j\sigma}^* |0\rangle = -c_{j\sigma}^* c_{i\sigma}^* |0\rangle \rightarrow c_{i\sigma}^* c_{j\sigma}^* = -c_{j\sigma}^* c_{i\sigma}^*$$

$$c_{j\sigma}^* c_{i\sigma} c_{i\sigma}^* |0\rangle = c_{j\sigma}^* (1 - n_{i\sigma}) |0\rangle = (1 - n_{i\sigma}) c_{j\sigma}^* |0\rangle = c_{i\sigma} c_{i\sigma}^* c_{j\sigma}^* |0\rangle = -c_{i\sigma} c_{j\sigma}^* c_{i\sigma}^* |0\rangle$$

$i \neq j$

$$c_{i\sigma} c_{j\sigma}^* = -c_{j\sigma}^* c_{i\sigma} \quad i \neq j$$

数演算子

$$c_{i\sigma}^* c_{i\sigma} = n_{i\sigma}$$

$$c_{i\sigma} c_{i\sigma}^* = 1 - n_{i\sigma}$$

生成消滅演算子の反交換関係

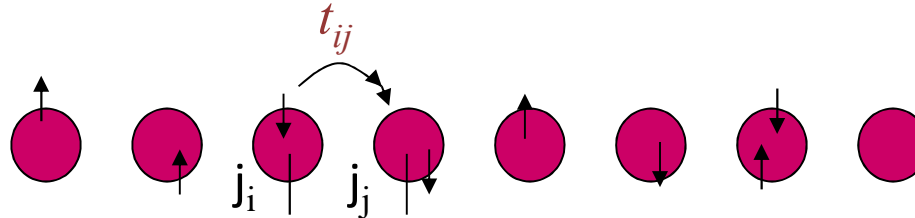
$$\{c_{j\sigma}^*, c_{i\sigma'}\} = c_{j\sigma}^* c_{i\sigma'} + c_{i\sigma'} c_{j\sigma}^* = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\{c_{j\sigma}^*, c_{i\sigma'}^*\} = c_{j\sigma}^* c_{i\sigma'}^* + c_{i\sigma'}^* c_{j\sigma}^* = 0$$

$$\{c_{j\sigma}, c_{i\sigma'}\} = c_{j\sigma} c_{i\sigma'} + c_{i\sigma'} c_{j\sigma} = 0$$

ハバード模型

直交基底関数 j



$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ji} c_{j\sigma}^* c_{i\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

i, j : サイト座標

s : スピン状態 ($\uparrow$ or $\downarrow$)

遷移積分

$$t_{ji} = \int d\mathbf{r} \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{d}_{ji}) H \varphi(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{d}_{ji} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$$

c^*, c : 電子の生成消滅演算子

$$\{c_{i\sigma}^*, c_{j\sigma'}\} = c_{i\sigma}^* c_{j\sigma'} + c_{j\sigma'} c_{i\sigma}^* = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\{c_{i\sigma}^*, c_{j\sigma'}^*\} = 0$$

$$\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = 0$$

$n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^* c_{i\sigma}$: 数演算子

H : 1体のハミルトニアン

(運動エネルギー + ポテンシャルエネルギー)

クーロンエネルギー

$$U = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi^*(\mathbf{r}_1) \varphi^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi(\mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_1)$$

ハバード模型

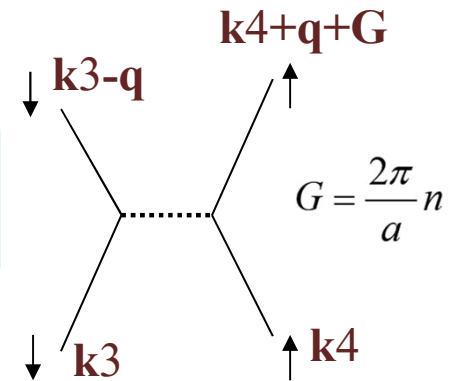
$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{j\sigma}^* c_{i\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

並進対称性

(t_{ij} は相対距離だけに依存 $|i-j|$)

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^* c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^* c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^* c_{\mathbf{k}_3\downarrow} c_{\mathbf{k}_4\uparrow} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4+\mathbf{G}}$$



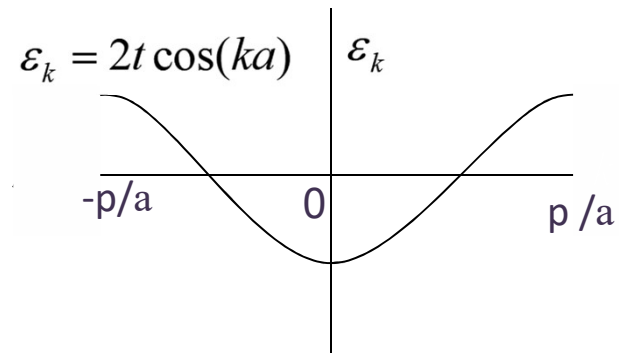
$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_i} = \sum_{(j-i)\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{R}_i} = \sum_{(j-i)\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} (t_{ij} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} + c.c.)$$

1D 最近接遷移だけを考慮すると

$$\varepsilon_k = 2t \cos(ka)$$

1D 最近接遷移模型のバンド分散



U/t クーロン相互作用

N_e/N 電子密度

N_e : 電子数

ハーフフィリングにおける有効模型

$N_e/N=1$ (1サイトあたり1電子)

t についての2次の摂動計算

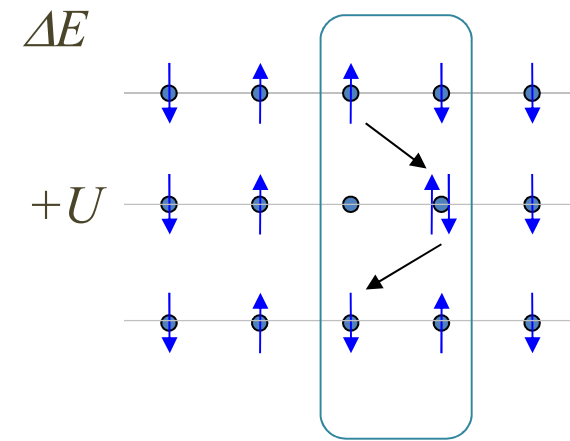
$$H = H_0 + H' \quad \text{two-electron problem}$$

$$= t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^* c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^* c_{1\sigma}) + U(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow})$$

$$\begin{aligned} & H_0 \frac{1}{E_0 - H'} H_0 c_{1\uparrow}^* c_{2\downarrow}^* |0\rangle \\ &= -\frac{t^2}{U} (\sum_{\sigma} c_{1\sigma}^* c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^* c_{1\sigma}) (c_{2\uparrow}^* c_{2\downarrow}^* + c_{1\uparrow}^* c_{1\downarrow}^*) |0\rangle \\ &= -\frac{t^2}{U} (c_{1\uparrow}^* c_{2\downarrow}^* - c_{1\downarrow}^* c_{2\uparrow}^* + c_{2\uparrow}^* c_{1\downarrow}^* - c_{2\downarrow}^* c_{1\uparrow}^*) |0\rangle \\ &= \frac{2t^2}{U} (2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - \frac{1}{2}) c_{1\uparrow}^* c_{2\downarrow}^* |0\rangle \end{aligned}$$

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_1^z S_2^z + \frac{1}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+)$$

スピン交換の過程



$t=0$ 各サイトに電子1つずつ

スピン縮退: 2^N

$$S_i^z = \frac{1}{2} (c_{i\uparrow}^* c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^* c_{i\downarrow})$$

$$S_i^+ = c_{i\uparrow}^* c_{i\downarrow}$$

$$S_i^- = c_{i\downarrow}^* c_{i\uparrow}$$