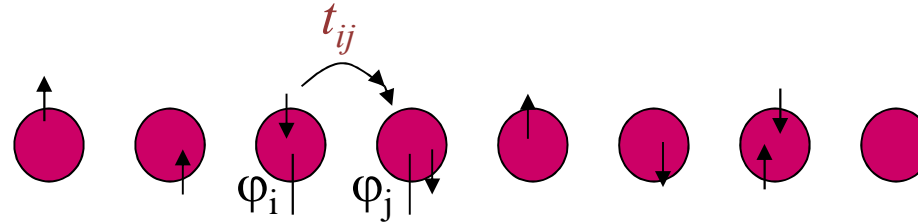


ハバード模型

直交基底関数 φ



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

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

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

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

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

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

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

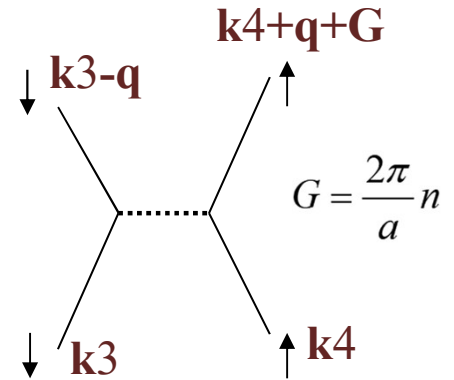
$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{j\sigma}^* c_{i\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

並進対称性

(t_{ij} は相対距離だけに依存 $|i-j|$)

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

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



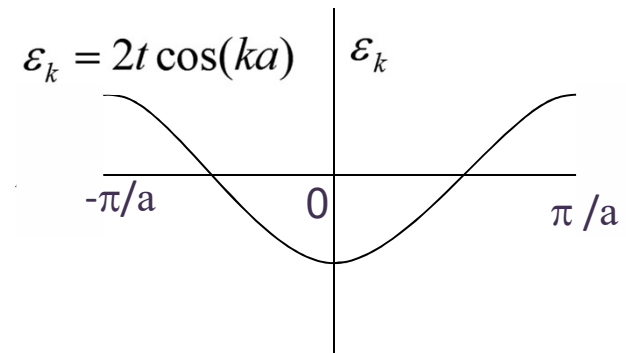
$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_i} = \sum_{(j-i)\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{R}_i}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

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

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

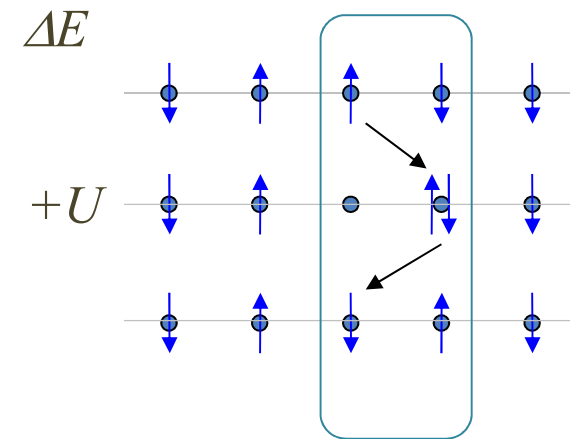
$$H = H_0 + H' \quad \text{two-electron problem}$$

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

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

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

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

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

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

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

反強磁性ハイゼンベルグ模型

$N_e/N=1$ ハバード模型

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

$U/t \gg 1$  t についての2次摂動

反強磁性ハイゼンベルグ模型

$$H_{eff} = 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad J = \frac{2t^2}{U} > 0$$

J : 超交換相互作用

$U = 0$ 電子系 (金属)
 $U \gg t$ 反強磁性スピン系 (絶縁体)

金属絶縁体転移の存在