Hubbard model

$\hat{N} = \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow})$

3 ハバード模型の基本的性質

以下のハバード模型について考えよう。第分配関数を考えて $H - \mu N$ をハミルトニアンと考える。

$$H - \mu N = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\underbrace{c^\dagger_{i,s} c_{j,s}}_{jからiへ} + \underbrace{c^\dagger_{j,s} c_{i,s}}_{iからjへ}) + \boxed{\underset{=}{U} \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}} - \underbrace{\mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})}_{\mu}$$

電子相関

電子-電子相互作用

大分配関数

フェルミ分布…

$\mathrm{Tr}\, e^{-\beta(H_0 - \mu \hat{N})}$

μなしのハミルトニアン

$\boxed{H_0 - \mu \hat{N}}$

$\hat{n}_{i\uparrow} = c^\dagger_{i\uparrow} c_{i\uparrow}$ iサイトの↑の電子の演算子

$\hat{n}_{i\downarrow} = c^\dagger_{i\downarrow} c_{i\downarrow}$

iサイトに↑と↓がそれぞれいる時の U

それ以外は0

3.1 $\boxed{U = 0}$ の場合 (自由粒子)

電子間の相互作用がない

周期的な d 次元系を考えるが，まず，一次元で N サイト系を考えよう。ハミルトニアンは以下のようになるが，

原子がN個

フェルミオンに

$$H = -t \sum_{j=1,s}^{N} (c^{\dagger}_{j+1,s} c_{j,s} + c^{\dagger}_{j,s} c_{j+1,s}) - \mu \sum_{j,s} c^{\dagger}_{j,s} c_{j,s},$$

$\{c_{i,s}, c_{j,s}\} = 0$

$\{c^{\dagger}_{i,s}, c^{\dagger}_{j,s'}\} = 0$

周期的境界条件は $\boxed{c_{i+N,s} = c_{i,s}}$ と書ける。まずスピン s ごとに考えれば良いことに注意して，s は書かない。ここで波数表示のフェルミ演算子を以下のように定義しよう。

フーリエ変換

$\Rightarrow \{c_{i,s}, c^{\dagger}_{j,s'}\} = \delta_{ij}\delta_{ss'}$

$$d(k_n) = N^{-1/2} \sum_{j=1}^{N} e^{ik_n j} c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\frac{2\pi}{N} n j} c_j$$

$$\boxed{k_n = \frac{2\pi}{N} n,} \quad n = 1, \cdots, N$$

$d_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j'} e^{ik_m j'} c_{j'}$

まず，以下の計算から，これらは通常のフェルミ演算子となる。

$$\boxed{\{d_n, d_m^\dagger\}} = N^{-1} \sum_{jk} e^{ik_n j - ik_m j'} \{c_j, c_{j'}^\dagger\}$$

$\{c_j, c_{j'}^\dagger\} = \delta_{jj'}$

$$= N^{-1} \sum e^{ik_n j - ik_m j'} \delta_{jj'}$$

$$= N^{-1} \sum_j e^{i(k_n - k_m)j} = \boxed{\delta_{k_n k_m}}$$

また

$$\boxed{N^{-1/2} \sum_{k_n} e^{-ik_n J} d(k_n)} = N^{-1} \sum_{k_n} \sum_j e^{-ik_n J + ik_n j} c_j = \sum_j \delta_{jJ} c_j = c_J$$

$\frac{1}{N} e^{ik_n(j-J)} = \delta_{jJ}$

$k_m = k_n \Rightarrow \sum_{j=1}^{N} e^0 = N \Rightarrow 1$ ✓

$k_m \neq k_n \Rightarrow \sum_{j=1}^{N} e^{i(k_n - k_m)j} \leftarrow$ 等比級数の和

r^j　　$r = e^{i\frac{2\pi}{N}(n-m)}$

$= \frac{1-r^N}{1-r} \cdot r^1 = 0$ ✓　$r^N = e^{i2\pi(n-m)} = 1$

$c_J = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_n} e^{-ik_n J} d(k_n)$

$c^\dagger_{j+1}$ $\quad c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_m} e^{-ik_m j} d(k_m)$

$$H = -t \sum_j N^{-1} \sum_{k_n} e^{ik_n(j+1)} d^\dagger(k_n) \sum_{k_m} e^{-ik_m j} d(k_m) + h.c.$$

エルミート共役

$$- \mu \sum_j N^{-1} \sum_{k_n} e^{ik_n j} d^\dagger(k_n) \sum_{k_m} e^{-ik_m j} d(k_m)$$

$(c^\dagger_{j+1} c_j)^\dagger = c^\dagger_j c_{j+1}$

$$= -t \sum_{k_n} \sum_{k_m} \left(N^{-1} \sum_j e^{ik_n} \underbrace{e^{i(k_n - k_m)j}}_{\delta_{k_n k_m} N} \right) d^\dagger(k_n) d(k_m) + h.c.$$

$$- \mu \sum_{k_n} \sum_{k_m} \left(\underbrace{N^{-1} \sum_j e^{i(k_n - k_m)j}}_{\delta_{k_n k_m}} \right) d^\dagger(k_n) d(k_m)$$

e^{-ik_n}

$$= -t \sum_{k_n} \sum_{k_m} \left[e^{ik_n} \left(\underbrace{N^{-1} \sum_j e^{i(k_n - k_m)j}}_{\delta_{k_n k_m}} \right) d^\dagger(k_n) d(k_m) + h.c. \right]$$

$e^{ik_m} d^\dagger(k_m) d(k_m)$

$$- \mu \sum_{k_n} \sum_{k_m} \left(\underbrace{N^{-1} \sum_j e^{i(k_n - k_m)j}}_{\delta_{k_n k_m}} \right) d^\dagger(k_n) d(k_m)$$

$$\boxed{= \sum_{k_n} \epsilon_{k_n} n_{k_n}}$$

$$\epsilon(k_n) = -2t \cos k_n - \mu, \quad n_{k_n} = d^\dagger(k_n) d(k_n)$$

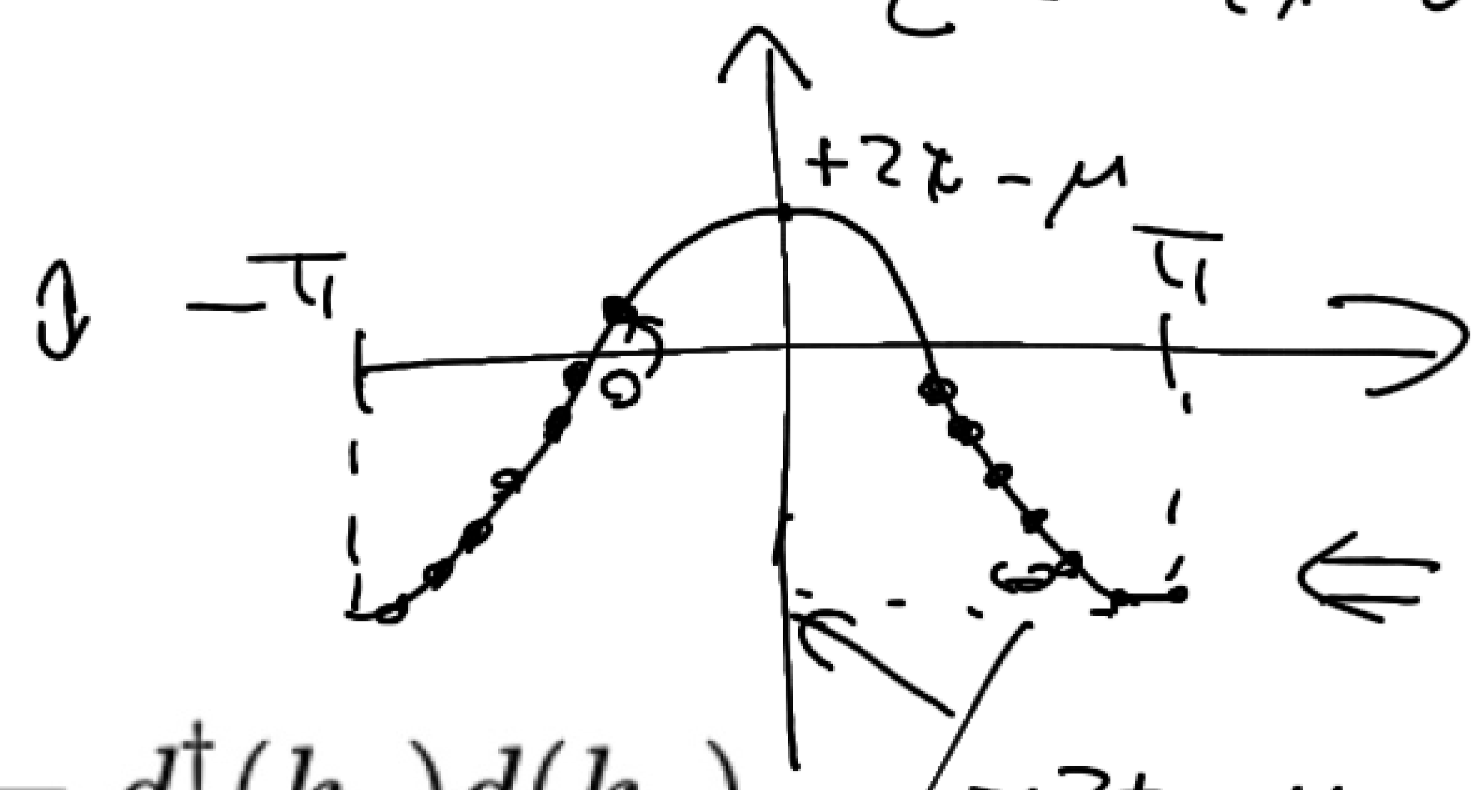
$$H = -t\sum_j c^\dagger_{j+1} c_j + h.c. - \mu \sum_j c^\dagger_j c_j \leftarrow U = 0$$

$$= \sum_{k_n} \epsilon_{k_n} n_{k_n}$$

$\epsilon = -2t\cos k - \mu$

$k : 0 \to 2\pi$

$k : -\pi \to \pi$



$\Leftarrow |F\rangle$

ここで

$$\epsilon(k_n) = -2t\cos k_n - \mu, \quad n_{k_n} = d^\dagger(k_n)d(k_n)$$

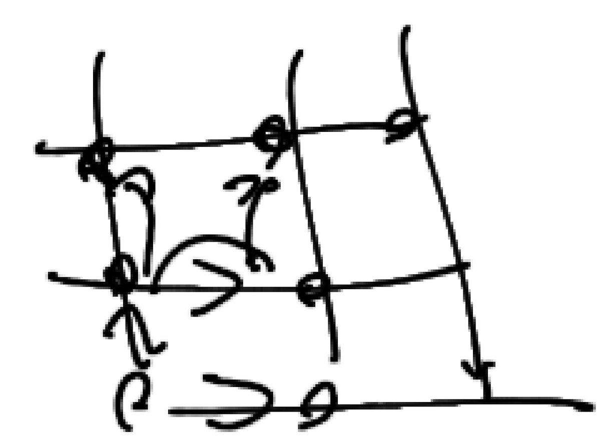
よって，基底状態は $\epsilon(k_n) < 0$ となる状態を（スピンの↑, ↓の 2 状態を含めて）全て占有した Fermi sea

$$|F\rangle = \prod_{k_n, \epsilon(k_n)<0} d^\dagger_{k_n\uparrow} d^\dagger_{k_n\downarrow}|0\rangle$$

$\delta \to 0$

が基底状態となる。なお $-2t < \mu < 2t$ であれば，$N \to \infty$ で励起エネルギーはゼロに漸近し，基底状態は金属的である。

高次元も同様である。例えば二次元正方格子では (k_x, k_y) を二次元の波数として $\epsilon(k_x, k_y) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$ となる。



$-t$ $-t$ $t \to 0$

3.2 $t = 0$ の場合 (孤立原子極限)

$t \to 0$ のいわゆる孤立原子極限では，任意の実空間での電子配置が固有状態となり N 粒子系のエネルギーは $\uparrow\downarrow$ が 2 重に占有されているサイト数 D で次のように定まる。

$$|\{n_{i,\uparrow}\}, \{n_{i,\downarrow}\}\rangle = \boxed{\prod_i (c^\dagger_{i,\uparrow})^{n_{i\uparrow}} (c^\dagger_{i,\downarrow})^{n_{i\downarrow}} |0\rangle}$$

$$E(\{n_{i,\uparrow}\}, \{n_{i,\downarrow}\}) = UD - \mu N \qquad U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$