

3.3 少数粒子系のハバード模型の固有状態

以下具体的にいくつかの場合を考えよう。まず、1 サイトの場合，を考えよう。この時は hopping は意味がないので，状態は以下の 4 通りでそれぞれが固有状態であり，全粒子数 $\hat{N}$ の固有値 N ，全スピンの z 成分の固有値 M_z と共に S_z エネルギーは次の表のようになる。

$$H = -t \sum_{i,j} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$\begin{array}{lcl} |0\rangle & 0 & 0 \\ |\uparrow\rangle = c_{\uparrow}^\dagger |0\rangle & 1 & \frac{1}{2} \\ |\downarrow\rangle = c_{\downarrow}^\dagger |0\rangle & 1 & -\frac{1}{2} \\ |\uparrow\downarrow\rangle = c_{\uparrow}^\dagger c_{\downarrow}^\dagger |0\rangle & 2 & +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \end{array}$$

粒子数 S^2 の固有値 (2e²)

状態	エネルギー	粒子数	M_z
✓ $ 0\rangle$	0	0	0
✓ $ \uparrow\rangle$	$-\mu$ //	1	$\frac{1}{2}$
✓ $ \downarrow\rangle$	$-\mu$ //	1	$-\frac{1}{2}$
$ \uparrow, \downarrow\rangle$	<u>U</u> $- 2\mu$ //	2	0

表 1: ハバード模型のエネルギー (1 サイト)

1.2
続いて2サイト系を全粒子数ごとに考えよう。なお全状態数は $4^2 = 16$ である。

- 粒子数 0 の場合はエネルギー 0

状態	エネルギー	粒子数	M_z
$ 0\rangle$	0	0	0

表 2: 2 サイト, 0 粒子のハバード模型のエネルギー

2サイト

- 粒子数 1 の場合, 状態数は ${}_4C_1 = 4$ であり U は効かない。

① $\uparrow, \downarrow$
② $\uparrow, \downarrow$

$$|\uparrow+, \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\rangle + |\uparrow_2\rangle)$$

$$|\uparrow-, \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\rangle - |\uparrow_2\rangle)$$

$$H|\uparrow+, \rangle = (-t - \mu)|\uparrow+, \rangle$$

$$H|\uparrow-, \rangle = (+t - \mu)|\uparrow-, \rangle$$

$\uparrow \rightarrow \downarrow$ も同様だから

状態	エネルギー	粒子数	M_z
$ \uparrow+, \rangle$	$(-t - \mu)$	1	$\frac{1}{2}$
$ \uparrow-, \rangle$	$(+t - \mu)$	1	$\frac{1}{2}$
$ \downarrow+, \rangle$	$(-t - \mu)$	1	$-\frac{1}{2}$
$ \downarrow-, \rangle$	$(+t - \mu)$	1	$-\frac{1}{2}$

$$c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} |\uparrow_1\rangle$$

$$= |\uparrow_2\rangle$$

$$c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} |\uparrow_2\rangle$$

$$= |\uparrow_1\rangle$$

表 3: 2 サイト, 1 粒子のハバード模型のエネルギー

- 粒子数 3 の場合, 状態数は $4C_3 = 4$ であり

3 粒子

↑ ↓ ↓

↑₁ ↑₂

↓₁ ↓₂

$$|\uparrow+, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle + |\uparrow_2, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle)$$

$$|\uparrow-, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle - |\uparrow_2, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle)$$

に対して

$$H|\uparrow+, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle = (-t + U - 3\mu)|\uparrow+, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle$$

$$H|\uparrow-, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle = (+t + U - 3\mu)|\uparrow-, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle$$

↑ → ↓ も同様だから

状態	エネルギー	粒子数	M_z
$ \uparrow+, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle$	$(-t + U - 3\mu)$	3	$-\frac{1}{2}$
$ \uparrow-, \downarrow_1 \downarrow_2\rangle$	$(+t + U - 3\mu)$	3	$-\frac{1}{2}$
$ \uparrow_1 \uparrow_2, \downarrow+\rangle$	$(-t + U - 3\mu)$	3	$\frac{1}{2}$
$ \uparrow_1 \uparrow_2, \downarrow-\rangle$	$(+t + U - 3\mu)$	3	$\frac{1}{2}$

表 4: 2 サイト, 3 粒子のハバード模型のエネルギー

- 粒子数 4 の場合は $|\uparrow_1\uparrow_2, \downarrow_2\downarrow_2\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle$ の 1 状態 のみで, そのエネルギーは $2U - 4\mu$

状態	エネルギー	粒子数	M_z
$ \uparrow_1\uparrow_2, \downarrow_2\downarrow_2\rangle$	<u>$2U - 4\mu$</u>	4	0

表 5: 2 サイト, 4 粒子のハバード模型のエネルギー

- 粒子数 2 の場合, 状態数は ${}_4C_2 = 6$ であり

$$\checkmark |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle$$

$$\checkmark |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle = c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

$$\cup \rightarrow 0$$

$$t \rightarrow 0$$

は固有状態でエネルギーは -2μ 残りの 4 状態は

$$\left\{ \begin{array}{l} |\uparrow_1, \downarrow_1\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle \\ |\uparrow_1, \downarrow_2\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle \\ |\uparrow_2, \downarrow_1\rangle = c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle \\ |\uparrow_2, \downarrow_2\rangle = c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned}
 H|\uparrow_1, \downarrow_1\rangle &= -t|\uparrow_2, \downarrow_1\rangle - t|\uparrow_1, \downarrow_2\rangle + (U - 2\mu)|\uparrow_1, \downarrow_1\rangle \\
 H|\uparrow_1, \downarrow_2\rangle &= -t|\uparrow_2, \downarrow_2\rangle - t|\uparrow_1, \downarrow_1\rangle + (-2\mu)|\uparrow_1, \downarrow_2\rangle \\
 H|\uparrow_2, \downarrow_1\rangle &= -t|\uparrow_1, \downarrow_1\rangle - t|\uparrow_2, \downarrow_2\rangle + (-2\mu)|\uparrow_2, \downarrow_1\rangle \\
 H|\uparrow_2, \downarrow_2\rangle &= -t|\uparrow_1, \downarrow_2\rangle - t|\uparrow_2, \downarrow_1\rangle + (U - 2\mu)|\uparrow_2, \downarrow_2\rangle
 \end{aligned}$$

よってこの基底ではハミルトニアンは

$$\begin{pmatrix}
 U - 2\mu & -t & -t & 0 \\
 -t & -2\mu & 0 & -t \\
 -t & 0 & -2\mu & -t \\
 0 & -t & -t & U - 2\mu
 \end{pmatrix}$$

4x4 行列

$U \neq 0$ の場合 t と U の競合が起きて状況は複雑になる。これが電子相関の効果である。

局所的 (粒子的) 競合
 $\rightarrow$ ホッピング $\rightarrow$ 非局所的 (自由粒子 $U=0$)