

7 ハバード模型の反強磁性

7.1 モット絶縁体とネール状態

次元によらず、全サイト数 N と等しい電子が存在する系をハーフフィルドと呼ぶが、この占有率（電子数）でハバード模型を考えよう。この時、各サイトに一電子ずつ電子が占有すれば、オンサイトのクーロン斥力 U の効果はゼロとなるので、 U が大きい、いわゆる強相関系においては低エネルギーの状態となり、 $U \rightarrow \infty$ では、この状態が基底状態となる。ただし、各サイトのスピン状態は \uparrow と \downarrow のいずれの状態でも同じエネルギーであるから全系を考えて 2^N 重にマクロな縮退を持った状態である。

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (U \gg t)$$

10

4+1-4電子 ハーフフィルド
Q O O O $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ (1-FFM)
+U
非常に大きな縮退
各サイトに1電子 $t \rightarrow \infty$ 縮退
2電子 (4+1-)

2^N の総数 \rightarrow 2(3)

つぎに U/t が大きいが有限である状況を考えると、摂動的に考えて、これらのスピン状態は混成し何らかのスピン間の相互作用が存在する。この状態においても、電子の移動に伴う励起状態も存在するが、明らかにそのような状態はクーロン斥力 U 程度のエネルギーをともなう。これを電荷励起と呼ぶ。それに比して有効的にうまれたスピン間の励起は小さなエネルギーの励起であると考えられ（以下の議論に従えば無限系では励起エネルギーゼロとなる）スピン励起と呼ばれる。これらの電荷励起がスピン励起に比して局所的なクーロン斥力程度大きな励起エネルギーを持つことにより生じる絶縁体状態はバンド絶縁体とは質的にことなり モット絶縁体 とよばれる。もし 電子の占有率がハーフフィルドより小さい場合電荷励起も低エネルギーとなり得て、（超伝導相など）多様な状態が出現する可能性があり、未だ未解決の問題である。 ここでは状況が簡単なハーフフィルドのハバード模型を考え、次節以下でその有効ハミルトニアンを導こう。

石井モデル：スピンのモードへ依存せずに一動起と記述
電荷励起へ
スピン励起