

1.9. Ферми-системы. Модель Хаббарда

Модель Хаббарда.
Приближение среднего поля.
Инварианты в модели Хаббарда.
Расчет средних

Модель Хаббарда

- Модель была предложена в 1964 г. для объяснения фазовых переходов "металл – изолятор" в переходных металлах с узкими зонами
- Модель Хаббарда (и ее расширенные аналоги) в настоящее время стала популярной в связи с исследованием высокотемпературных сверхпроводников, наноструктур, квантовых точек и ям

● Гамильтониан $H = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{p_1 p_2 p'_1 p'_2 \sigma \sigma'} V_{p_1 p_2 p'_1 p'_2} a_{p_1 \sigma}^+ a_{p_2 \sigma'}^+ a_{p'_2 \sigma'} a_{p'_1 \sigma}$ ГВИЕМ:

● В координатах $H_{kin} = \sum_{k \neq j, \sigma} t_{kj} a_{k\sigma}^+ a_{j\sigma}$; $t_{kj} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p e^{i\vec{p}(\vec{r}_k - \vec{r}_j)} \sim e^{-\frac{|\vec{r}_k - \vec{r}_j|}{a_B}}$

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ a_{l\sigma'} a_{k\sigma}; \quad V_{ijkl} = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{p_1 p_2 \\ p'_1 p'_2}} V_{p_1 p_2 p'_1 p'_2} e^{-i(\vec{p}_1 \vec{r}_i + \vec{p}_2 \vec{r}_j - \vec{p}'_2 \vec{r}_l - \vec{p}'_1 \vec{r}_k)}$$

Пример

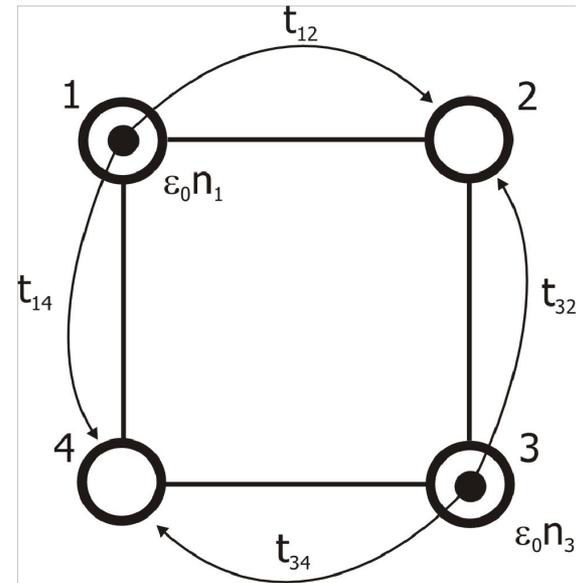
- Система из четырех узлов с двумя бесспиновыми ферми-частицами:

$$H = \sum_{i=1}^4 (0.3n_i - a_i^+ a_{i+1} - a_i^+ a_{i-1})$$

- Базис $\Phi_1 = |0011\rangle$, $\Phi_2 = |0101\rangle$, $\Phi_3 = |0110\rangle$,
 $\Phi_4 = |1001\rangle$, $\Phi_5 = |1010\rangle$, $\Phi_6 = |1100\rangle$

- Гами

$$H = \begin{pmatrix} 0.6 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0.6 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0.6 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0.6 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 0.6 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0.6 \end{pmatrix}$$



- После приведения гамильтонической матрицы к диагональному виду получаем спектр системы:

$$E_1 = -1.4; \quad E_2 = -1.4; \quad E_3 = 0.6;$$

$$E_4 = 0.6; \quad E_5 = 2.6; \quad E_6 = 2.6$$

Модель Хаббарда.

Приближение среднего поля

- Для модели Хаббарда и ее модификаций нельзя строго провести аналитический расчет

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- Приближение среднего поля: задача из многочастичной превращается в эффективную одночастичную:

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \approx \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle \equiv \langle n_{\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{\downarrow} \rangle;$$

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \langle n_{-\sigma} \rangle$$

- В импульсном представлении гамильтониан диагонален:

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}; \quad \varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k + U \langle n_{-\sigma} \rangle$$

- Для расчета средних чисел заполнения необходимо решить самосогласованную систему уравнений (модель Стонера)

Пример

- Система из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами:

$$H = - \sum_{i=1}^3 \sum_{\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} + a_{i\sigma}^+ a_{i-1,\sigma}) + U \sum_{i=1}^3 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- Базис системы:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |001,001\rangle; & \Phi_2 &= |010,001\rangle; & \Phi_3 &= |100,001\rangle; \\ \Phi_4 &= |001,010\rangle; & \Phi_5 &= |010,010\rangle; & \Phi_6 &= |100,010\rangle; \\ \Phi_7 &= |001,100\rangle; & \Phi_8 &= |010,100\rangle; & \Phi_9 &= |100,100\rangle \end{aligned}$$

- Гамильтонова матрица:

$$H = \begin{pmatrix} U & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & U & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & U \end{pmatrix}$$

Пример

- Спектр без взаимодействия:

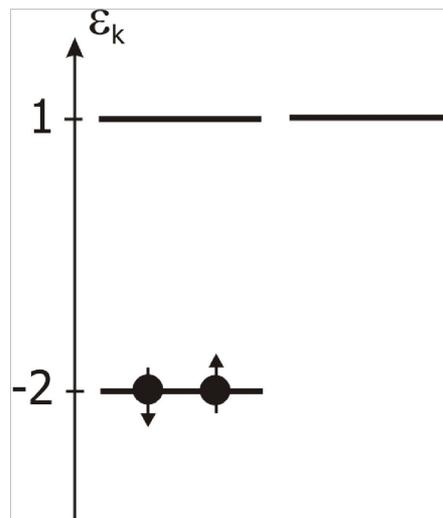
$$\varepsilon_k = -2 \cos ka$$

- Разрешенные одночастичные уровни для одной проекции спина:

$$\varepsilon_1 = -2 \cos(0) = -2; \quad \varepsilon_{2,3} = -2 \cos\left(\pm \frac{2\pi}{3}\right) = \pm 1$$

- Основное состояние:

$$E_{(0)} = 2\varepsilon_1 = -4$$

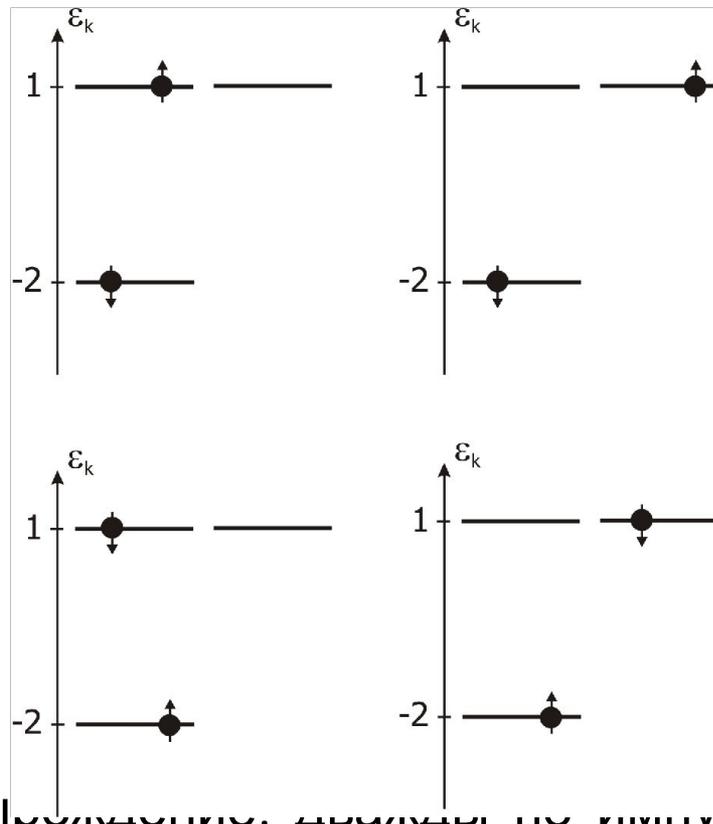


Основное состояние невырождено

Пример

- Первое возбужденное состояние:

$$E_{(1)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = -1$$



- Четырехкратное вырождение: дважды по импульсу и дважды по спину

Пример

- Второе возбужденное состояние также четырехкратно вырождено
- Спектр системы:

$$E_1 = -4; \quad E_{2,3,4,5} = -1; \quad E_{6,7,8,9} = 2$$

- При ненулевом взаимодействии:

$$E_1 = -3.903; \quad E_{2,3} = -1; \quad E_{4,5} = -0.8069;$$

$$E_6 = 2; \quad E_{7,8} = 2.1069; \quad E_9 = 2.2033;$$

$$U = 0.3$$

- Приближение среднего поля изменило бы спектр на величину порядка

$$\Delta E = U(\langle n_{\downarrow} \rangle + \langle n_{\uparrow} \rangle) = U \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3} \right) = 0.2$$

- Для возбужденных уровней приближение среднего поля работает хуже
- Если при слабом взаимодействии еще удастся качественно проследить за изменением спектра, то при $U \sim t$ это становится невозможным

Инварианты в модели Хаббарда

- В модели Хаббарда сохраняется число частиц:

$$[H, N] = HN - NH = 0; \quad N = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$$

- Для частиц со спином гамильтониан коммутирует с оператором полной проекции спина на ось z:

$$S^Z = \frac{1}{2} \sum_i (a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$$

- Гамильтонова матрица может быть представлена в блочно-диагональном виде:

$$H = \begin{pmatrix} \boxed{N=1} & & & & & & \\ \boxed{S^Z = -1/2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ & 0 & \boxed{N=1} & & & & \\ & & \boxed{S^Z = +1/2} & 0 & 0 & 0 & \\ & 0 & 0 & \boxed{N=2} & & & \\ & & & \boxed{S^Z = -1} & 0 & 0 & \\ & 0 & 0 & 0 & \boxed{N=2} & & \\ & & & & \boxed{S^Z = 0} & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{N=2} & \\ & & & & & \boxed{S^Z = +1} & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{\dots} \end{pmatrix}$$

Расчет средних

- Среднее число частиц на узле в основном состоянии:

$$\langle n_i \rangle = \langle \Psi_0 | n_i | \Psi_0 \rangle = \sum_{nm} C_{n0}^* C_{m0} \langle \Phi_n | n_i | \Phi_m \rangle = \sum_n |C_{n0}|^2 n_i^{(n)}$$

- Недиагональные корреляторы:

$$\langle a_i^+ a_j \rangle = \sum_{nm} C_{n0}^* C_{m0} \langle \Phi_n | a_i^+ a_j | \Phi_m \rangle$$

- Вырожденные состояния:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{i\varphi} \Psi_2)$$

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{-i\varphi} \Psi_2) \left| n_i \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{i\varphi} \Psi_2) \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_1 | n_i | \Psi_1 \rangle + \frac{1}{2} \langle \Psi_2 | n_i | \Psi_2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle n_i^{(1)} \rangle + \langle n_i^{(2)} \rangle) \end{aligned}$$

