

Hubbardin mallin eksakti diagonalisointi

Topi Siro

Hubbardin malli

- Yksinkertainen malli kiinteässä aineessa vuorovaikuttavista elektroneista

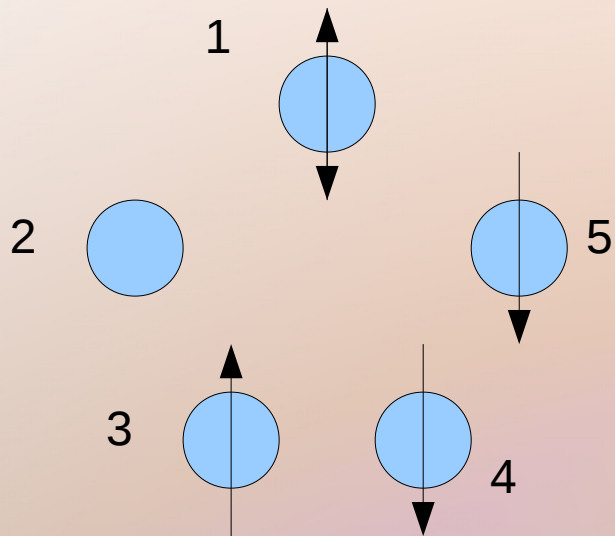
- $$H = H_{hop} + H_{int} = T \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- H_{hop} kuvaa elektronien hyppimistä hilapisteestä toiseen
- H_{int} kuvaa samassa pisteessä olevien elektronien vuorovaikutusta
- Yksinkertaisuudestaan huolimatta Hubbardin mallilla on paljon mielenkiintoisia ominaisuuksia (ferro- ja antiferromagnetismi, suprajohtavuus...)

Hubbardin malli

- Mallin monimuotoisuus johtuu siitä, että vaikka sekä H_{hop} että H_{int} ovat erikseen helposti diagonalisoitavissa, ne eivät kommutoi, ja niiden summan diagonalisointi on vaikeaa
- Analyttinen ratkaisu on mahdollinen 1D:ssä (Lieb & Wu 1968)
- Jo 1D:ssä mielenkiintoisia ilmiöitä, kuten spin-
varaus-separaatio

Eksakti diagonalisointi



- Konstruoidaan H jossain kannassa
- Tässä tapauksessa S_z :n ominaistilat ovat luonnollinen valinta
- Vasemmalla oleva tila voisi olla esim. $|00101\rangle$ $|11001\rangle$

\nearrow	\nearrow
ylös-spinit	alas-spinit

- Numeroidaan tilat:

$ 00011\rangle$	$ 00111\rangle$	\rightarrow	0
$ 00011\rangle$	$ 01011\rangle$	\rightarrow	1
$ 00011\rangle$	$ 01101\rangle$	\rightarrow	2
$ 00101\rangle$	$ 00111\rangle$	\rightarrow	10
$ 00101\rangle$	$ 01011\rangle$	\rightarrow	11

Eksakti diagonalisointi

- Sitten vain diagonalisoidaan H
- Käytännössä usein vaikeaa tai mahdotonta H :n suuren koon vuoksi (esim. 16 hilapistettä, 8 ylös- ja 8 alas-elektronia $\rightarrow \dim H = 166 * 10^6$)
- Yleensä ollaan kiinnostuneita vain alimmista energiatiloista, jolloin voidaan käyttää koko matriisin diagonalisointia tehokkaampia menetelmiä (esim. Lanczos)

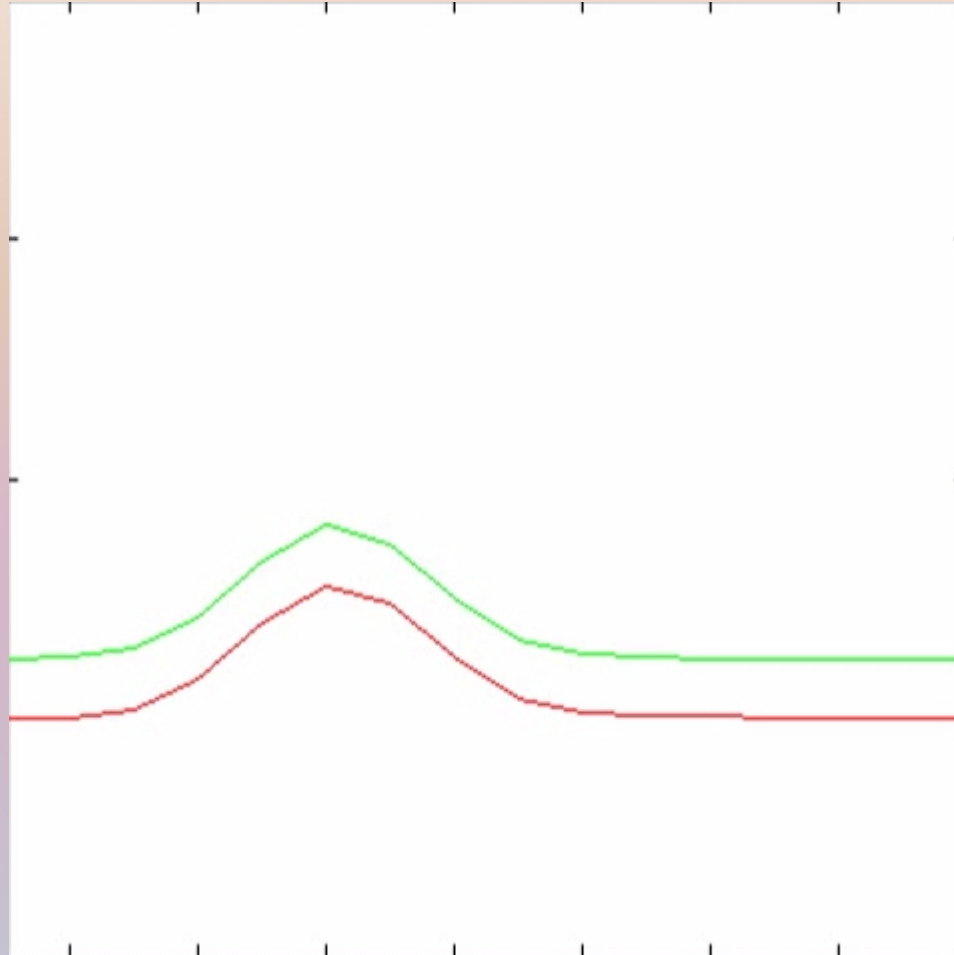
Spin-varaus-separaatio

- Esimerkkinä spin-varaus-separaatiosta 1D:ssä laskettiin aikakehitystä aaltopakettille, joka syntyy, kun luodaan ylös-elektroni kahden elektronin perustilaan:

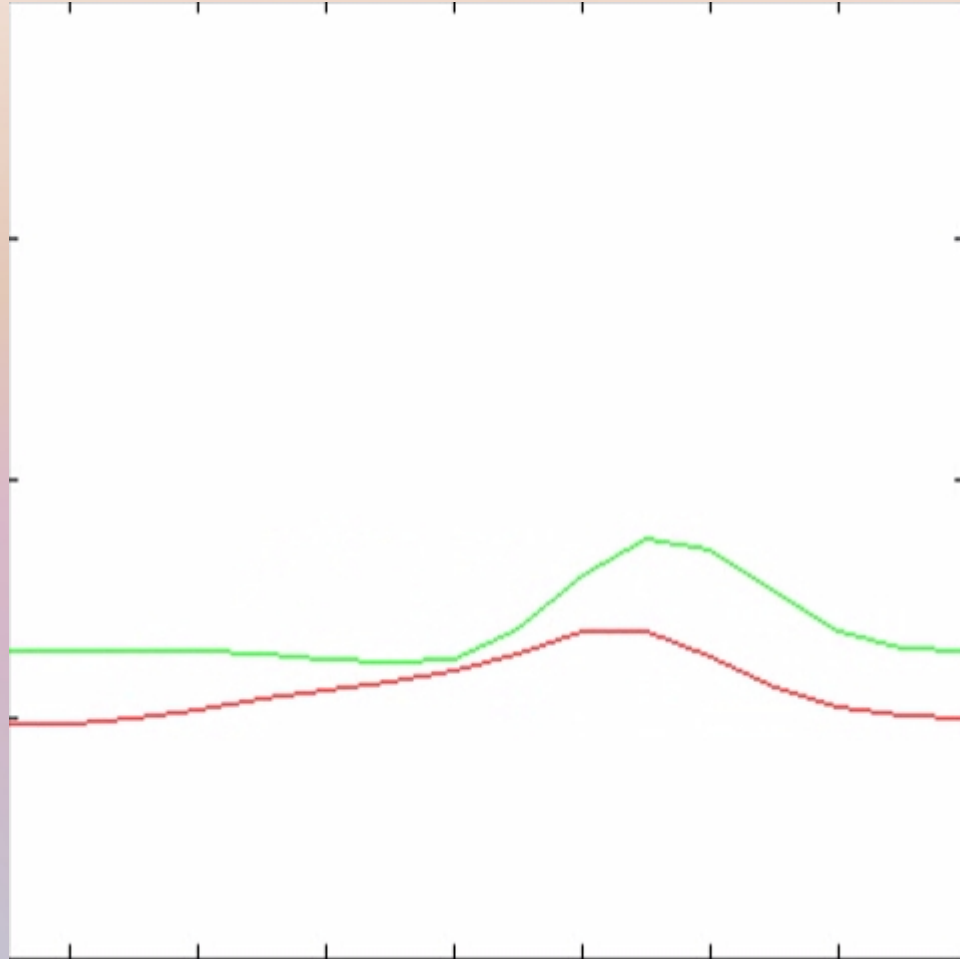
$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_i c_i a_{i\uparrow}^\dagger |\phi_0\rangle$$

- Kertoimet c on valittu niin, että ne tuottavat gaussisen aaltolukujakauman, jolloin saadaan hilassa etenevä aaltopaketti
- Simulaatiossa nähdään, että varaus etenee spiniä nopeammin, ja eksitaatiot vuorovaikuttavat keskenään

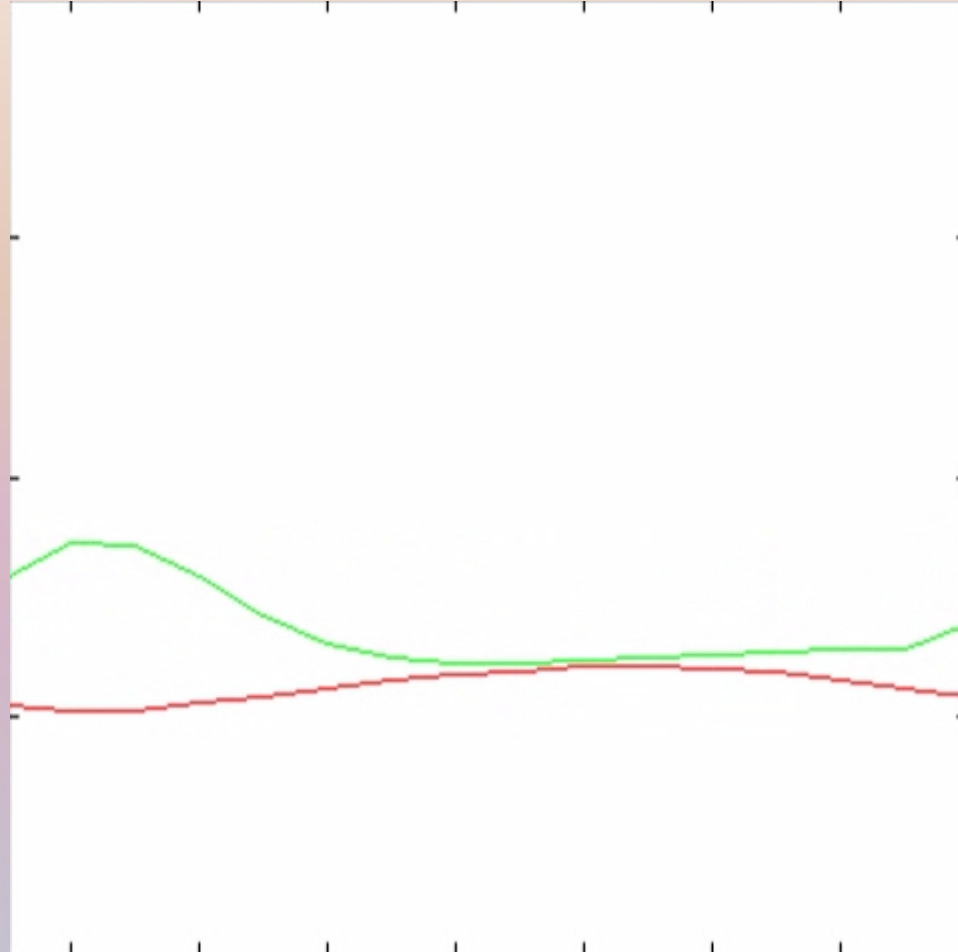
animaatio-backup



animaatio-backup



animaatio-backup



animaatio-backup

