Hubbardin malli

24.2.2011

Topi Siro

Sisältö

- Johdanto
- Hamiltonin funktio
- 1-ulotteinen rengas
- Bethen yrite
- Magnetismi

Johdanto

- Malli kiinteässä aineessa vuorovaikuttavista elektroneista
- Yksinkertaisuudestaan huolimatta pystyy kuvaamaan monia elektronien vuorovaikutuksesta syntyviä ilmiöitä kuten ferromagnetismia
- Analyyttinen ratkaisu onnistuu vain 1D:ssä (Lieb & Wu 1968)

Johdanto

- Kiinteässä aineessa atomit muodostavat hilan
- Oletetaan, että kullakin atomilla on vain yksi degeneroitumaton tila, jolloin elektronin tilaa kuvaa vektori, jonka komponentteina ovat amplitudit löytää elektroni kyseisestä atomista
- Elektronit voivat hyppiä atomista toiseen, ja samassa atomissa olevat elektronit hylkivät toisiaan

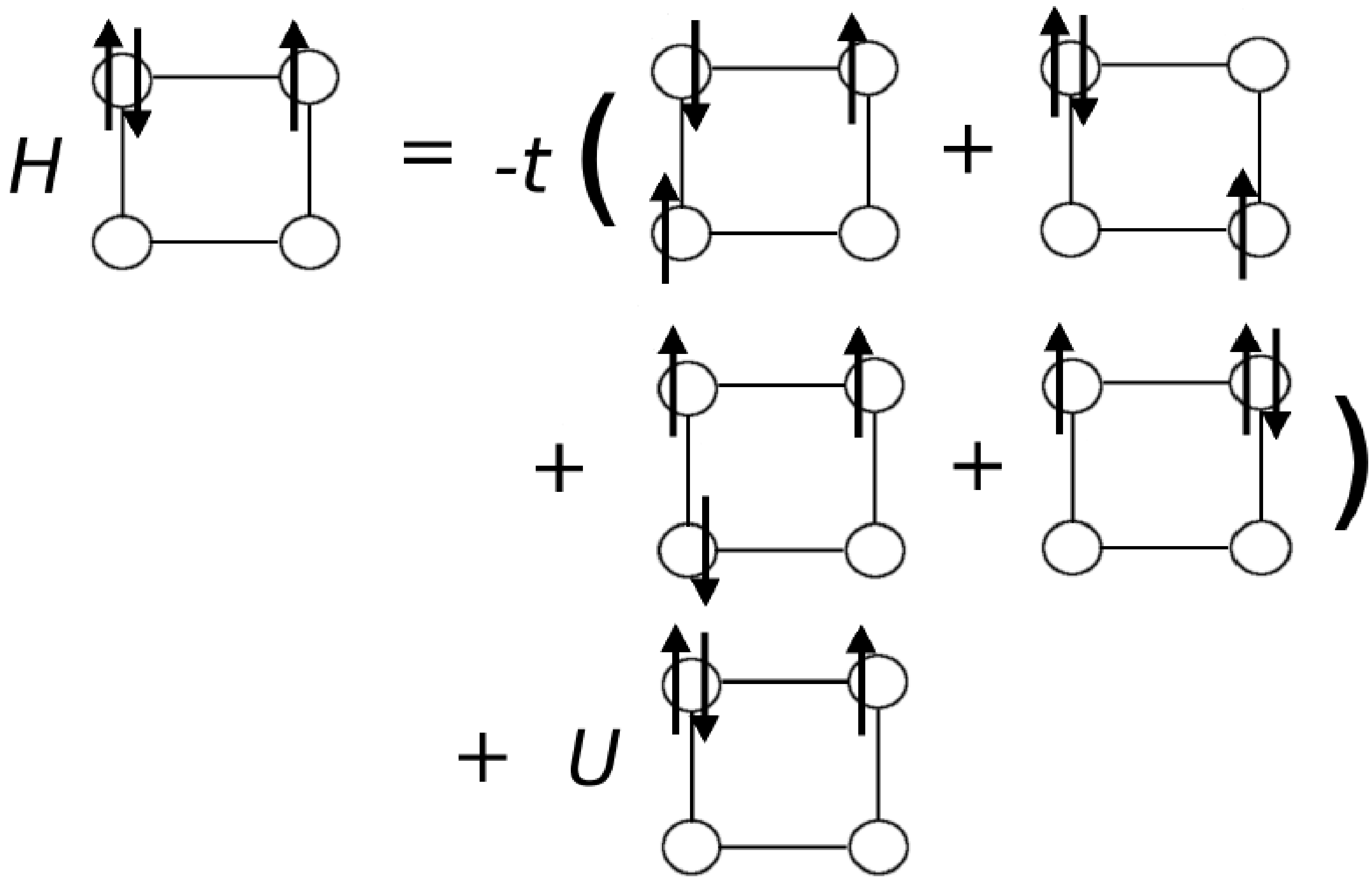
Hamiltonin funktio

- Näillä oletuksilla saadaan

$$H = H_{hop} + H_{int} = -\sum_{<ij>}\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t_{i,j}(c^{\dagger}_{i,\sigma}c_{j,\sigma} + h.c) + U\sum_{i} n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow},$$

- H_{hop} kuvaa elektronien hyppimistä amplitudilla t (yleensä vakio)
- H_{int} kuvaa samassa hilapisteessä olevien atomien vuorovaikutusta (U > 0)

Hamiltonin funktio



Hamiltonin funktio

- Hiukkasluvut säilyvät:

$$\left[H, \sum_{i=1}^{N_s} n_{i,\sigma}\right] = [H, N_\sigma] = 0, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow$$

- Voidaan siis kiinnittää ylös- ja alas-elektronien lukumäärät
- Huom! H ei suoraan suosi mitään magneettista järjestystä, toisin kuin esim. Ising-malli

1-ulotteinen rengas

- Yksinkertaisin hila on 1D-rengas, jossa vain lähinaapurien väliset hyppäykset ovat sallittuja
- Tutkitaan ensin vuorovaikuttamatonta systeemiä, $H_{int} = 0$:

$$H = H_{hop} = -t \sum_{<ij>} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + h.c),$$

- Yksihiukkastilat ovat siten

$$|i\rangle = c_i^{\dagger} |\mathcal{O}\rangle$$

1-ulotteinen rengas

- Suora lasku osoittaa, että ominaistilat ovat aaltoja:

$$f_x^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} e^{ikx}$$

- Hilan periodisuus rajoittaa liikemäärää k:

$$f_x^{(k)} = f_{x+N_s}^{(k)} \Longleftrightarrow e^{ikx} = e^{ik(x+N_s)}$$

$$e^{ikN_s} = 1 \Longleftrightarrow k = \frac{2\pi n}{N_s},$$

1-ulotteinen rengas

- Ominaisenergiat ovat

$$\epsilon(k) = -2t \cos k.$$

- Monen hiukkasen tapaus on nyt helppo, koska ilman vuorovaikutusta voidaan asetella elektroneja yksihiukkastiloille pitäen mielessä Paulin kieltosäännön

1-ulotteinen rengas

- Myös H_{int} yksinään diagonalisoituu helposti. Ominaistilat ovat triviaalisti

$$\Psi_{L_\uparrow,L_\downarrow} = \left(\prod_{i\in L_\uparrow} c_{i,\uparrow}^\dagger\right)\left(\prod_{i\in L_\downarrow} c_{i,\downarrow}^\dagger\right)|\mathcal{O}\rangle$$

missä L:t ovat osajoukkoja hilapisteistä siten että $|L_\uparrow| + |L_\downarrow| = N$

- Energiat ovat

$$E^{int}_{L_\uparrow,L_\downarrow} = U|L_\uparrow \cap L_\downarrow|$$

1-ulotteinen rengas

- Edellä nähtiin, että H_{hop} näkee elektronit aaltoina, kun taas H_{int} pitää niitä hilapisteisiin lokalisoituneina hiukkasina
- Matemaattisesti tämä vastaa sitä, että operaattorit eivät kommutoi
- Erilaisesta luonteesta seuraa, että koko Hamiltonin operaattorin diagonalisointi on vaikeaa, mutta toisaalta aalto- ja hiukkasluonteiden kilpailu tuottaa mielenkiintoista fysiikkaa

Bethen yrite

- Analyyttinen ratkaisu yleisessä tapauksessa onnistuu Bethen yritteellä (Bethe 1931)
- Havainnollistetaan idea kahden hiukkasen tapauksessa: olkoon $f_{\sigma_1,\sigma_2}(x_1,x_2)$ amplitudi tilalle, jossa hiukkanen i on pisteessä x_i ja sen spin on σ_i
- Schrödingerin yhtälö on

$$-t\,[\,f_{\sigma_1\sigma_2}(x_1+1,x_2)+f_{\sigma_1\sigma_2}(x_1-1,x_2)+f_{\sigma_1\sigma_2}(x_1,x_2+1)$$

$$+f_{\sigma_1\sigma_2}(x_1,x_2-1)\,]+U\delta_{\sigma_1-\sigma_2}\delta_{x_1x_2}f_{\sigma_1\sigma_2}(x_1,x_2)=Ef_{\sigma_1\sigma_2}(x_1,x_2)$$

Bethen yrite

- Kun $x_1 \neq x_2$ hiukkaset eivät vuorovaikuta, ja ratkaisu on tulo yhden hiukkasen ratkaisuista:

$$f_{\sigma_1,\sigma_2}(x_1, x_2) = \mathcal{A}e^{ik_1x_1+ik_2x_2}\left[A_{\sigma_1\sigma_2}\theta(x_2 - x_1) + B_{\sigma_1\sigma_2}\theta(x_1 - x_2)\right]$$

- Parametriavaruus jakautuu siis alueisiin $x_1 < x_2$ ja $x_2 < x_1$
- Ominaisarvo f:lle on

$$E = -2t(\cos k_1 + \cos k_2)$$

- Erona aikaisempaan on, että nyt k:t riippuvat U:sta

Bethen yrite

- Kertoimille A ja B saadaan yhtälö, kun ratkaistaan Schrödingerin yhtälö alueiden rajalla, eli tapauksessa $x_1 = x_2$
- Alueesta toiseen siirtyminen voidaan tulkita sironnaksi, joka tapahtuu amplitudilla

$$s = \frac{B}{A} = \frac{i(\sin k_1 - \sin k_2) + \frac{U}{2t}}{i(\sin k_1 - \sin k_2) - \frac{U}{2t}}$$

- Lopuksi täytyy vielä ratkaista liikemäärät k, joille saadaan taas yhtälö periodisista reunaehdoista:

Bethen yrite

$$
\begin{aligned}
f_{\sigma_1\sigma_2}(0, x_2) &= f_{\sigma_1\sigma_2}(N_s, x_2) \\
f_{\sigma_1\sigma_2}(x_1, 0) &= f_{\sigma_1\sigma_2}(x_1, N_s)
\end{aligned}
$$

- Näistä saadaan yhtälöt

$$
\begin{aligned}
k_1 N_s + \phi(k_1, k_2) &= 2\pi I_1 \\
k_2 N_s + \phi(k_2, k_1) &= 2\pi I_2
\end{aligned}
$$

missä I:t ovat puolilukuja ja

$$
\phi = -2 \arctan \left(\frac{\sin k_2 - \sin k_1}{U/2t} \right)
$$

Bethen yrite

- Yhteenvetona, Bethen yritteen ideana on jakaa parametriavaruus alueisiin, joissa elektronit ovat vapaita
- Ratkaisemalla Schrödingerin yhtälö alueiden reunoilla, saadaan sirontamatriisi, joka liittää eri alueiden ratkaisut toisiinsa
- Lopulta periodiset reunaehdot antavat yhtälöt liikemäärille k, jotka riippuvat U:sta

Bethen yrite

- 1D-rengas ratkeaa myös yleisellä hiukkasluvulla edellä mainitulla menetelmällä, joskin lasku on huomattavasti monimutkaisempi ja työläämpi
- Lopputuloksena termodynaamisella rajalla saadaan integraaliyhtälöitä, jotka ratkeavat suljetussa muodossa vain tapauksessa, jossa hila on puoliksi täynnä ($N = N_s / 2$)

Magnetismi

- Yleisesti mallin sanotaan olevan ferromagneettinen, jos perustilan kokonaisspin kasvaa verrannollisena hilan kokoon
- Tyydyttyneessä (?) ferromagnetismissa perustilan kokonaisspin saa suurimman arvonsa, $S_{tot} = S_{max} = \frac{1}{2}N$
- Ferromagnetismin mielenkiintoisen luonteen osoittavat seuraavat kaksi Hubbardin malliin liittyvää tulosta:

Magnetismi

- **Liebin teoreema**: Olkoon kaksijakoinen yhtenäinen hila, jossa on parillinen määrä hilapisteitä. Tällöin kaikilla U>0 puolitäyttöisen Hubbardin mallin perustilan kokonaisspin on $S_{tot} = ||A| - |B||/2$, missä A ja B ovat hilan partitiot
- Tämä sulkee pois ferromagnetismin esim. puolitäyttöisellä neliöhilalla, missä A ja B ovat yhtäsuuret, ja kokonaisspin siis nolla.
- Yllättävä tulos saadaan, kun poistetaan yksi elektroni, sillä silloin pätee seuraavaa:

Magnetismi

- **Nagaokan teoreema**: Kun $N = N_s - 1$, $U = \infty$, niin Hubbardin mallin perustilan kokonaisspin on $S_{tot} = S_{max} = N/2$
- Yo. teoreema vaatii hilalta, että mistä tahansa konfiguraatiosta on päästävä kaikkiin muihin liikuttelemalla reikää, mutta tämä pätee kaikille tavallisimmille hiloille
- Puolitäytetty neliöhila äärettömällä repulsiolla muuttuu siis ferromagneettiseksi, kun poistetaan yksi elektroni!

Yhteenveto

- Hubbardin malli näyttää yksinkertaiselta, mutta pystyy tuottamaan mielenkiintoista fysiikkaa
- Ratkeaa analyyttisesti vain yksiulotteisessa tapauksessa, jolloin voidaan käyttää Bethen yritettä
- Hubbardin mallissa esiintyy magneettista järjestystä, vaikka Hamiltonin funktio ei sellaista suoraan suosi

Kiitos!