Preslikava med Hubbardovim modelom in modelom tJ

Izračun preslikave med Hubbardovim in tJ modelom v primerih brez nereda in z neredom

Jan Šuntajs

25. maj 2018

1 Uvod

Zanima nas izpeljava preslikave med Hubbardovim in tJ modelom, pri čemer želimo pravilno obravnavati vlogo potencialnega nereda, ki se sklaplja bodisi z nosilci naboja bodisi s spini. Uvodoma obravnavamo enostavnejši primer brez dodatnega naključnega nereda, v drugem delu pa vključimo tudi tega.

2 Primer brez nereda

Obravnavamo Hubbardov model, ki ga v približku tesne vezi podaja hamiltonka

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, s} \left(c_{i,s}^\dagger c_{js} + c_{js}^\dagger c_{is} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \tag{1}$$

Pri tem $\langle ij \rangle$ označuje vsoto po najbližjih sosedih, s pa vsoto po projekcijah spina na os z. Fermionski kreacijski in anihilacijski operatorji $c_{i,s}^\dagger, c_{i,s}$ ustvarijo oziroma uničijo delec z dano projekcijo spina s na i-tem mestu v kristalni rešetki. Med izpeljavo bomo pri zapisu večdelčnih stanj upoštevali naslednjo ureditev fermionskih operatorjev

$$|\psi\rangle = \prod_{\{i_\uparrow\}} c_{i,\uparrow}^\dagger \prod_{\{j_\downarrow\}} c_{j,\downarrow}^\dagger |0\rangle,$$

kjer je $|0\rangle$ vakuumsko stanje, produkta pa tečeta po vseh mestih, na katerih se nahajajo spini z dano projekcijo.

V hamiltonki, ki jo podaja En. (1), kinetični člen H_{kin} opisuje skakanje elektronov med sosednjimi mesti v kristalni rešetki, pri čemer je t verjetnost za tovrstno tuneliranje. Interakcijski člen H_{int} modelira coulombski odboj med elektroni in ob dvojni zasedenosti mesta povzroči energijski prirastek U. V limitnem primeru $t \to 0$, oziroma v limiti popolnoma lokaliziranih enodelčnih valovnih funkcij, so večdelčna stanja brez dvojne zasedenosti mest medsebojno degenerirana pri ničelni energiji. Pri izpeljavi modela tJ predpostavimo močno coulombsko interakcijo U in posledično nizko koncentracijo energijsko neugodnih dvojno zasedenih mest. V tem primeru so visokoenergijska stanja z dvojno zasedenimi mesti v energijskem spektru dobro ločena od stanj z največ enojno zasedenimi mesti. Za opis nizkoenergijskih stanj Hubbardove hamiltonke, podane z En. (1), torej v tej limiti zadošča obravnava problema na podprostoru največ enojno zasedenih stanj.

Preslikavo med Hubbardovim modelom in modelom tJ bomo izpeljali perturbativno, začenši v limiti popolnoma lokaliziranih enodelčnih valovnih funkcij, kjer kot neperturbirani del hamiltonke vzamemo interakcijski člen $H_{\rm int}$, kinetični člen $H_{\rm kin}$ pa vključimo kot perturbacijo. Zanima nas oblika efektivne hamiltonke $\tilde{H}$, s katero v limiti močne coulombske interakcije opišemo fiziko nizkoenergijskih stanj Hubbardove hamiltonke. Ker se v slednji sklapljajo le sosednja mesta, lahko problem brez škode za splošnost obravnavamo na dveh sosednjih mestih. Ob upoštevanju prepovedi dvojne zasedenosti mest razpenjajo bazo pripadajočega Hilbertovega podprostora naslednja stanja:

$$\begin{aligned}
&|\alpha_1\rangle = |\overset{i}{\uparrow}\overset{j}{\uparrow}\rangle = c^\dagger_{i,\uparrow}c^\dagger_{j,\uparrow}|0\rangle \quad &&|\alpha_2\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = c^\dagger_{i,\downarrow}c^\dagger_{j,\downarrow}|0\rangle\\
&|\alpha_3\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle = c^\dagger_{i,\uparrow}c^\dagger_{j,\downarrow}|0\rangle \quad &&|\alpha_4\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle = c^\dagger_{j,\uparrow}c^\dagger_{i,\uparrow}|0\rangle\\
\\
&|\alpha_5\rangle = |\uparrow\bullet\rangle = c^\dagger_{i,\uparrow}|0\rangle \quad &&|\alpha_6\rangle = |\bullet\uparrow\rangle = c^\dagger_{j,\uparrow}|0\rangle\\
&|\alpha_7\rangle = |\downarrow\bullet\rangle = c^\dagger_{j,\downarrow}|0\rangle \quad &&|\alpha_8\rangle = |\bullet\downarrow\rangle = c^\dagger_{j,\downarrow}|0\rangle
\end{aligned} \tag{2}$$

Označimo podprostor stanj brez vrzeli z $\{|\alpha^0\rangle\}$ in podprostor stanj z vrzeljo $\{|\alpha^1\rangle\}$. Prepovedana stanja z energijo U in dvojno zasedenostjo mest bomo potrebovali pri perturbacijski obravnavi in jih zapišemo kot

$$|\beta\rangle = |\overset{i}{\uparrow\downarrow}\,\overset{j}{\bullet}\rangle = c^\dagger_{i,\uparrow}c^\dagger_{i,\downarrow}|0\rangle, \qquad |\beta'\rangle = |\overset{i}{\bullet}\,\overset{j}{\uparrow\downarrow}\rangle = c^\dagger_{j,\uparrow}c^\dagger_{j,\downarrow}|0\rangle. \tag{3}$$

V modelu tJ so skoki delcev med posameznimi mesti dovoljeni le v primeru, ko je na ciljnem mestu pred skokom vrzel. Formalno zahtevi zadostimo z uvedbo projiciranih fermionskih operatorjev $\tilde{c}_{is}$ v skladu s predpisom

$$\tilde{c}^\dagger_{is} = c^\dagger_{is}\left(1 - n_{i-s}\right), \tag{4}$$

s čimer preprečimo možnost dvojne zasedenosti posameznega mesta. Kinetični del $\tilde{H}_{\rm kin}$ efektivne hamiltonke $\tilde{H}$ tako dobimo v prvem redu perturbacije z delovanjem operatorja $H_{\rm kin}$ na podprostoru $\{|\alpha^1\rangle\}$. S projiciranimi operatorji ga zapišemo kot

$$\tilde{H}_{\rm kin} = -t\sum_{\langle ij\rangle s}\left(\tilde{c}^\dagger_{i,s}\tilde{c}_{js} + \tilde{c}^\dagger_{js}\tilde{c}_{is}\right). \tag{5}$$

Pri nadaljnji perturbacijski obravnavi moramo upoštevati drugi red degenerirane perturbacijske teorije, saj v podprostoru $\{|\alpha^0\rangle\}$ direktni matrični elementi $\langle\alpha|H_{\rm kin}|\alpha\rangle$ ne obstajajo, vsa stanja $|\alpha\rangle$ pa so ob odsotnosti perturbacije degenerirana. Matrične elemente efektivne hamiltonke v tem primeru podaja zveza

$$\left(\tilde{H}_{\rm eff}\right)_{\alpha,\alpha'} = \sum_{\beta\neq\alpha}\frac{\langle\alpha|H_{\rm kin}|\beta\rangle\langle\beta|H_{\rm kin}|\alpha'\rangle}{E^0_\alpha - E^0_\beta}, \tag{6}$$

kjer vsota teče po vzbujenih stanjih, podanih z En. (3). Hitro vidimo, da je $H_{\rm kin}|\beta\rangle = H_{\rm kin}|\beta'\rangle = -t\left(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle\right)$ in da so potemtakem neničelni le matrični elementi $\tilde{H}_{33} = \tilde{H}_{44} = \tilde{H}_{34} = \tilde{H}_{43} = -\frac{2t^2}{U}$. Tu smo upoštevali $E^0_\alpha - E^0_\beta \sim -U$. Če zapišemo matrične elemente $\tilde{H}_{\rm eff}$ kot

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_{33} &= |\alpha_3\rangle\langle\alpha_3| = \frac{-2t^2}{U}c^\dagger_{i,\uparrow}c^\dagger_{j,\downarrow}c_{j,\downarrow}c_{i,\uparrow} = \frac{2t^2}{U}c^\dagger_{i,\uparrow}c_{i,\uparrow}c^\dagger_{j,\downarrow}c_{j,\downarrow},\\
\tilde{H}_{44} &= |\alpha_4\rangle\langle\alpha_4| = \frac{-2t^2}{U}c^\dagger_{j,\uparrow}c^\dagger_{i,\downarrow}c_{i,\downarrow}c_{j,\uparrow} = \frac{2t^2}{U}c^\dagger_{j,\uparrow}c_{j,\uparrow}c^\dagger_{i,\downarrow}c_{i,\downarrow},\\
\tilde{H}_{34} &= |\alpha_3\rangle\langle\alpha_4| = \frac{-2t^2}{U}c^\dagger_{i,\uparrow}c^\dagger_{j,\downarrow}c_{i,\downarrow}c_{j,\uparrow} = \frac{2t^2}{U}c^\dagger_{i,\uparrow}c_{i,\downarrow}c^\dagger_{j,\downarrow}c_{j,\uparrow},\\
\tilde{H}_{43} &= |\alpha_4\rangle\langle\alpha_3| = \frac{-2t^2}{U}c^\dagger_{j,\uparrow}c^\dagger_{i,\downarrow}c_{j,\downarrow}c_{i,\uparrow} = \frac{2t^2}{U}c^\dagger_{j,\uparrow}c_{j,\downarrow}c^\dagger_{i,\downarrow}c_{i,\downarrow},
\end{aligned} \tag{7}$$

potem lahko $\tilde{H}_{\rm eff}$ zapišemo kot

$$\tilde{H}_{\rm eff} = \frac{2t^2}{U}\sum_{\langle ij\rangle s}\left[\tilde{c}^\dagger_{i,s}\tilde{c}_{i,-s}\tilde{c}^\dagger_{j,-s}\tilde{c}_{j,s} + n_{i,s}n_{j,-s}\right]. \tag{8}$$

En. (8) lahko prikladneje zapišemo z uporabo spinskih operatorjev. Prepoznamo namreč $S_i^+ = \tilde{c}_{i,\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i,\downarrow}$ in $S_i^- = \tilde{c}_{i,\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{i,\uparrow}$, pri zapisu $\sum_s n_{i,s} n_{j,-s}$ pa uporabimo zvezi $n_i = (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow})$ in $S_i^z = \frac{1}{2}(n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})$. Dobimo

$$
\begin{aligned}
\tilde{H}_{\text{eff}} &= \frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \left[\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) - \frac{n_i n_j - 4 S_i^z S_j^z}{2} \right] = \\
&= J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i \cdot S_j - \frac{n_i n_j}{4} \right].
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Pri tem smo vpeljali izmenjalno sklopitev $J = \frac{4t^2}{U}$, na vmesnem koraku zgornje izpeljave pa smo uporabili enakost $2S_i \cdot S_j = 2S_i^z S_j^z + S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^+$. Celotna hamiltonka $\tilde{H}$ se ob upoštevanju mobilnih vrzeli in sklopitve magnetnih prostorskih stopenj zapiše kot

$$
\tilde{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle s} \left(\tilde{c}_{i,s}^\dagger \tilde{c}_{js} + \tilde{c}_{js}^\dagger \tilde{c}_{is} \right) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i \cdot S_j - \frac{n_i n_j}{4} \right]
\tag{10}
$$

3 Dodatek nereda

Tokrat nas zanima, na kateri tip nereda v tJ modelu se preslika nered, ki ga v Hubbardovem modelu sklopimo bodisi s spini bodisi z vrzelmi. Hamiltonki, ki jo podaja En. (1), v vsej splošnosti dodamo člen z neredom kot

$$
H = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} + H_{\text{dis}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, s} \left(c_{i,s}^\dagger c_{js} + c_{js}^\dagger c_{is} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,s} h_{i,s} n_{i,s}
\tag{11}
$$

kjer so $h_{i,s}$ v skladu z neko verjetnostno porazdelitvijo izžrebane naključne vrednosti, pri čemer sta porazdelitvi za posamezni projekciji spina v splošnem lahko različni. V prvem redu perturbacije dobimo za kinetični člen in člen z neredom naslednji izraz

$$
\tilde{H}_{\text{kin}} + \tilde{H}_{\text{dis}} = -t \sum_{\langle ij \rangle s} \left(\tilde{c}_{i,s}^\dagger \tilde{c}_{js} + \tilde{c}_{js}^\dagger \tilde{c}_{is} \right) + \sum_{i,s} h_{i,s} \left(1 - n_{i,-s} \right) n_{i,s}
\tag{12}
$$

Na mestih i, j smo tako dodali nered $h_{\{i,j\},s}$. Stanji $|\beta\rangle$ in $|\beta'\rangle$ imata sedaj energiji

$$
E_\beta = U + h_{i,\uparrow} + h_{i,\downarrow}, \qquad E_{\beta'} = U + h_{j,\uparrow} + h_{j,\downarrow}
\tag{13}
$$

za uporabo perturbacijske teorije drugega reda pa potrebujemo bazo medsebojno degeneriranih stanj. Iz stanj, podanih v En. (2), sestavimo bazo

$$
|\tilde{\alpha_3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle \right), \qquad |\tilde{\alpha_4}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha_3\rangle - |\alpha_4\rangle \right).
\tag{14}
$$

Od prej vemo, da stanji $|\alpha_1\rangle$ in $|\alpha_2\rangle$ za našo izpeljavo nista pomembni, saj bosta prispevali le ničelne matrične elemente v efektivni hamiltonki, medtem ko sta zgornji stanji ob odsotnosti perturbacije degenerirani z energijo

$$
E_0^\alpha = \frac{1}{2} \left(h_{i,\uparrow} + h_{i,\downarrow} + h_{j,\uparrow} + h_{j,\downarrow} \right).
$$

Takoj vidimo, da je $H_{\text{kin}}|\beta\rangle = H_{\text{kin}}|\beta'\rangle = -t\left(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle \right) = -t\sqrt{2}|\tilde{\alpha}_3\rangle$. V efektivni hamiltonki imamo tako samo člen

$$
\tilde{H}_{\tilde{3},\tilde{3}} = 2t^2 \left(\frac{1}{U - \Xi_{i,j}} + \frac{1}{U + \Xi_{i,j}} \right),
$$

kjer je

$$
\Xi_{i,j} = \frac{1}{2} \sum_s \left(h_{i,s} - h_{j,s} \right).
$$

V bazi stanj $|\alpha_3\rangle, |\alpha_4\rangle$ imamo tako

$$\tilde{H}_{3,3} = \tilde{H}_{4,4} = \tilde{H}_{3,4} = \tilde{H}_{4,3} = t^2 \left(\frac{1}{U - \Xi_{i,j}} + \frac{1}{U + \Xi_{i,j}} \right).$$

Od tu naprej je razprava enaka kot zgoraj, zaradi vpliva nereda očitno postane tudi sklopitvena konstanta krajevno odvisna, $J \to J_{i,j}$, kjer je

$$J_{i,j} = 2t^2 \left(\frac{1}{U - \Xi_{i,j}} + \frac{1}{U + \Xi_{i,j}} \right). \tag{15}$$

V odsotnosti nereda pridemo nazaj v predhodni primer, $J = \frac{4t^2}{U}$. Z dodatkom nereda se tako Hubbardova hamiltonka, podana z En. (1), v hamiltonko modela tJ preslika kot

$$\tilde{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle s} \left(\tilde{c}^\dagger_{i,s} \tilde{c}_{js} + \tilde{c}^\dagger_{js} \tilde{c}_{is} \right) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{i,j} \left[S_i \cdot S_j - \frac{n_i n_j}{4} \right] + \sum_{i,s} h_{i,s} \left(1 - n_{i,-s} \right) n_{i,s}. \tag{16}$$

-