Preslikava med Hubbardovim modelom in modelom tJ

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

Jan Šuntajs

15. 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

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

kjer $\langle ij \rangle$ označuje vsoto po najbližjih sosedih, $s$ pa vsoto po projekcijah spina na os $z$. Kinetični člen $H_{\text{kin}}$ opisuje skakanje elektronov med sosednjimi mesti v kristalni rešetki, pri čemer je $t$ verjetnost za tovrstno tuneliranje. Interakcijski člen $H_{\text{int}}$ modelira coulombski odboj med elektroni in ob dvojni zasedenosti mesta v kristalni rešetki povzroči energijski prirastek $U$, sicer pa so konfiguracije brez dvojnih zasedenosti mest energijsko degenerirane pri poljubno izbrani ničli energije.

Preslikavo med Hubbardovim in tJ modelom bomo izpeljali perturbativno, pri čemer bomo v limiti popolnoma lokaliziranih valovnih funkcij kot neperturbirani del hamiltonke podane z En. (1) vzeli člen $H_{\text{int}}$, $H_{\text{kin}}$ pa bomo obravnavali kot perturbacijo. Obravnavamo naslednja stanja

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

pri čemer gre za projekcijo na podprostor stanj z največ enojno zasedenostjo posameznih mest. Vzbujena stanja z energijo $U$ in dvojno zasedenostjo mest tipa

$$|\beta\rangle = |\ldots \overset{i}{\uparrow\downarrow} \overset{j}{\bullet} \ldots\rangle, \qquad |\beta'\rangle = |\ldots \overset{i}{\bullet} \overset{j}{\uparrow\downarrow} \ldots\rangle \tag{3}$$

so namreč v modelu tJ prepovedana. To tudi pomeni, da so skoki elektronov med posameznimi mesti v modelu tJ dovoljeni le v primeru, ko je na ciljnem mestu pred skokom vrzel. Še pred perturbativno obravnavo lahko tako zapišemo kinetični del $\tilde{H}_{\text{kin}}$ preslikane hamiltonke $\tilde{H}$ kot

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

kjer so $\tilde{c}_{is}$ fermionski operatorji, projicirani na podprostor stanj, v katerem dvojna zasedenost ni možna. Velja

$$\tilde{c}_{is} = (1 - n_{i-s})\, c_{is}. \tag{4}$$

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

$$\left(\tilde{H}_{\text{eff}}\right)_{\alpha,\alpha'} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \alpha | H_{\text{kin}} | \beta \rangle \langle \beta | H_{\text{kin}} | \alpha' \rangle}{E^0_\alpha - E^0_\beta}, \tag{5}$$

kjer vsota teče po vzbujenih stanjih, podanih z En. (3). Hitro vidimo, da je $H_{\text{kin}}|\beta\rangle = H_{\text{kin}}|\beta'\rangle = -t\left(|\alpha_3\rangle - |\alpha_4\rangle\right)$ 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 $E^0_\alpha - E^0_\beta \sim U$. $\tilde{H}_{\text{eff}}$ lahko zapišemo tudi kot

$$\tilde{H}_{\text{eff}} = \frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle s} \left[ \tilde{c}^\dagger_{i,s} \tilde{c}_{i,-s} \tilde{c}^\dagger_{j,-s} \tilde{c}_{j,s} - n_{i,s} n_{j,-s} \right], \tag{6}$$

kar se prikladneje zapiše s spinskimi operatorji. V En. (6) namreč lahko prepoznamo $S^+_i = \tilde{c}^\dagger_{i,\uparrow}\tilde{c}_{i,\downarrow}$ in $S^-_i = \tilde{c}^\dagger_{i,\downarrow}\tilde{c}_{i,\uparrow}$, pri zapisu $\sum_s n_{i,s} n_{j,-s}$ pa uporabimo zvezi $n_i = (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow})$ in $S^z_i = \frac{1}{2}(n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})$. Dobimo

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{eff}} &= \frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ \left(S^+_i S^-_j + S^-_i S^+_j\right) - \frac{n_i n_j - 4 S^z_i S^z_j}{2} \right] = \\ &= J \sum_{\langle ij \rangle} \left[ S_i \cdot S_j - \frac{n_i n_j}{4} \right]. \end{aligned} \tag{7}$$

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

$$\tilde{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle s} \left( \tilde{c}^\dagger_{i,s} \tilde{c}_{js} + \tilde{c}^\dagger_{js} \tilde{c}_{is} \right) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left[ S_i \cdot S_j - \frac{n_i n_j}{4} \right] \tag{8}$$

# 3 Dodatek nereda

Tokrat nas zanima, na kateri tip nereda v tJ modelu se preslika potencialni nered, ki ga v Hubbardovem modelu sklopimo bodisi s spini bodisi z vrzelmi, ki jih označimo s simbolom $\bullet$. V vsej splošnosti zapišimo Hubbardovo hamiltonko z dodatkom nereda kot

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, s} \left( c^\dagger_{i,s} c_{js} + c^\dagger_{js} c_{is} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,s} h_{i,s} n_{i,s} + \sum_i w_i n_{i,\bullet}, \tag{9}$$

kjer so $h_i$ in $w_i$ v skladu z neko porazdelitvijo naključno izžrebane vrednosti nereda, ki se sklaplja s spini oziroma z vrzelmi. Podobno kot v prejšnjem primeru lahko še pred perturbativno obravnavo pišemo

$$\tilde{H}_{\text{kin}} + \tilde{H}_{\text{disord.}} = -t \sum_{\langle ij \rangle s} \left( \tilde{c}^\dagger_{i,s} \tilde{c}_{js} + \tilde{c}^\dagger_{js} \tilde{c}_{is} \right) + \sum_{i,s} h_{i,s} \left(1 - n_{i,-s}\right) n_{i,s} + \sum_i w_i n_{i,\bullet} \qquad \text{DODELAJ!} \tag{10}$$

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

$$E_\beta = U + h_{i,\uparrow} + h_{i,\downarrow} + w_j, \qquad E_{\beta'} = U + h_{j,\uparrow} + h_{j,\downarrow} + w_i, \tag{11}$$

za uporabo perturbacijske teorije drugega reda pa potrebujemo bazo medsebojno degeneriranih stanj. Iz stanj, podanih v En. (7), sestavimo bazo

$$
\begin{aligned}
|\tilde{\alpha_1}\rangle =& \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle\right), \qquad |\tilde{\alpha_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\alpha_1\rangle - |\alpha_2\rangle\right) \\
|\tilde{\alpha_3}\rangle =& \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle\right), \qquad |\tilde{\alpha_4}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\alpha_3\rangle - |\alpha_4\rangle\right).
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Ob odsotnosti perturbacije so namreč ta stanja degenerirana z energijo $E_0^\alpha = \frac{1}{2}\left(h_{i,\uparrow} + h_{i,\downarrow} + h_{j,\uparrow} + h_{j,\downarrow}\right)$