

Jacek Wojtkiewicz

Katedra Metod Matematycznych Fizyki

**O modelu Hubbarda
słów kilka**

IV. DNI IFT, WARSZAWA, 2-3.12.2005

- " Co to jest model Hubbarda?",
- "Czterdzieści lat minęło jak jeden dzień..." – niektóre fakty z 40-letniej historii,
- Niektóre z osiągnięć: (ferro)magnetyzm,
- Niektóre otwarte problemy.

Model Hubbarda: Sieciowy model oddziaływujących elektronów.

Jeden z najważniejszych modeli w fizyce ciała stałego.
(Stwierdzenie subiektywne; bardziej wymierne kryterium: jeden z najczęściej badanych modeli – 300 prac rocznie)

Model “elementarny”: Trudno wyobrazić sobie model bardziej uproszczony.

Wszystko powinno być tak proste, jak to tylko możliwe – ale nie prostsze” – A. Einstein

Hamiltonian modelu:

$$H_\Lambda = T_\Lambda + V_\Lambda,$$

Λ – skończony podzbiór sieci periodycznej w \mathbb{R}^n ,

$$T_\Lambda = - \sum_{x,y \in \Lambda; \sigma} t_{xy} c_{x;\sigma}^\dagger c_{y;\sigma} + \text{h.c.} \quad (1)$$

$$V_\Lambda = U \sum_{x \in \Lambda} n_{x,+} n_{x,-}, \quad (2)$$

$c_{x;\sigma}^\dagger, c_{x;\sigma}$ – operatory kreacji i anihilacji dla fermionów o spinie σ na węźle x . $n_{x;\sigma} = c_{x;\sigma}^\dagger c_{x;\sigma}$ – operator liczby cząstek.

Inne wyrazy (o mniejszych amplitudach):

$$\begin{aligned} H^{(1)} = & \sum_{\langle x,y \rangle} [V n_x n_y \\ & + X \sum_{\sigma} (c_{x;\sigma}^\dagger c_{y;\sigma} + \text{h.c.}) (n_{x,-\sigma} + n_{y,-\sigma}) \\ & + F' (c_{x;\uparrow}^\dagger c_{x;\downarrow}^\dagger c_{y;\uparrow} c_{y;\downarrow} + \text{h.c.}) \\ & - 2F (\mathbf{S}_x \cdot \mathbf{S}_y + \frac{1}{4} n_x n_y)] \quad (3) \end{aligned}$$

Tu: $n_x = n_{x,\uparrow} + n_{x,\downarrow}$; $\mathbf{S}_x = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c_{x,\sigma}^\dagger \boldsymbol{\tau}_{\sigma,\sigma'} c_{x,\sigma'}$, $\boldsymbol{\tau}$ – wektor macierzy Pauliego.

Rozważa się też modele *wielopasmowe* (elektrony mają kilka stopni swobody na węźle).

Model Hubbarda nie jest modelem fundamentalnym:

Wyprowadza się go z równania Schrödingera przez wiele przybliżeń i założeń.

Model został wprowadzony przez J. Hubbarda w r. 1963 (niezależnie: Gutzwiller, Kanamori).

Pierwotna motywacja: Opis ferromagnetyzmu metalicznego (“itinerant”) – mało skuteczna (przy użyciu ówczesnie dostępnych metod)

Inne zjawiska, do badania których stosowano model Hubbarda:

- inne uporządkowania magnetyczne (antyferromagnetyzm, ferrimagnetyzm, metamagnetyzm ...)
- MIT-ologia (Metal-Insulator Transition)
- nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe
- ...

Wierzy się, że model Hubbarda wyjaśnia te zjawiska.

Dowodów jest jednak niewiele!

Model jest “*notoriously difficult*” – E. Lieb.

“Czterdzieści lat minęło...” i co się w tym czasie wydarzyło:

- $d = 1$: Ścisłe rozwiązanie (ansatz Bethego) – E. Lieb, F. Wu (1967)
 - **Daje się wyliczyć** funkcje termodynamiczne (F, U, S, C_v, \dots)
 - **Nie udało się** wyliczyć w ogólnej postaci funkcji korelacji.
 - Istnieją efektywne metody numeryczne w $d = 1$.
- $d = \infty$: Jeśli wymiar układu jest dostatecznie duży to jest to okoliczność *ułatwiająca*, a nie utrudniająca badanie.
 - Metoda: **DMFT** (Dynamical Mean Field Theory) – Metzner, Vollhardt 1989.
 - Obliczono: wiele statycznych (np. ferromagnetyzm) i dynamicznych (przewodnictwo) funkcji termodynamicznych.
 - **Problem:** Czy z $d = \infty$ jest blisko czy daleko do $d = 3$?
- Wymiary pośrednie: $d = 2, d = 3$.
 - Wyniki ścisłe: rzadkie.
 - kwantowa metoda Monte Carlo: “Negative sign problem”
 - Metoda grupy renormalizacyjnej: dobrze działa głównie dla $d = 1$.

Ferromagnetyzm elektronów wędrownych.

- Możliwość opisu ferromagnetyzmu w ramach mechaniki kwantowej: oddziaływanie wymienne – Heisenberg 1928: $(\mathbf{S}_x \cdot \mathbf{S}_y)$
- Oddziaływanie to jest *zbyt słabe*, poza tym nie może to wyjaśniać ferromagnetyzmu *metalicznego*: Bloch, 1929.

Opis w ramach najprostszego modelu Hubbarda.

Hamiltonian modelu Hubbarda *nie zawiera* spinu. Za uporządkowania magnetyczne są odpowiedzialne wyłącznie wyrazy niezależne od spinu elektronów:

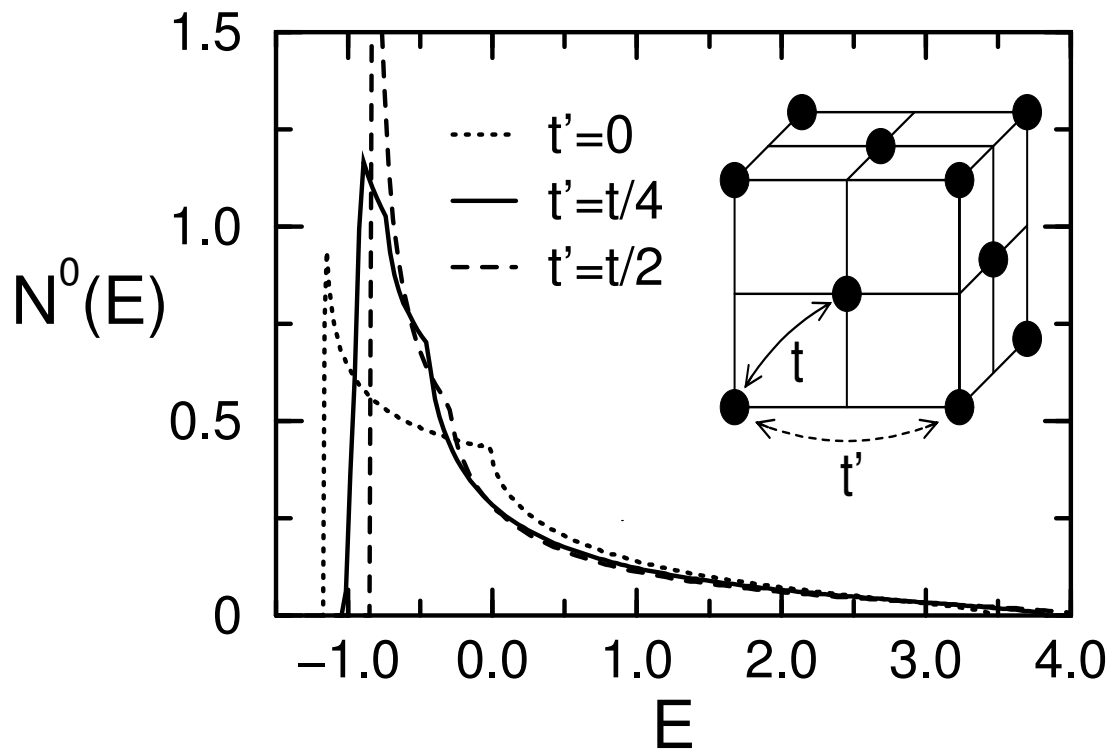
- energia kinetyczna T ,
- oddziaływanie Coulomba V ,
- zakaz Pauliego.

Parametry modelu:

$$t/U; T; \rho_{\uparrow} = N_{\uparrow}/N, \rho_{\downarrow} = N_{\downarrow}/N$$

Ferromagnetyzm nie jest obecny w *całym* zakresie parametrów:

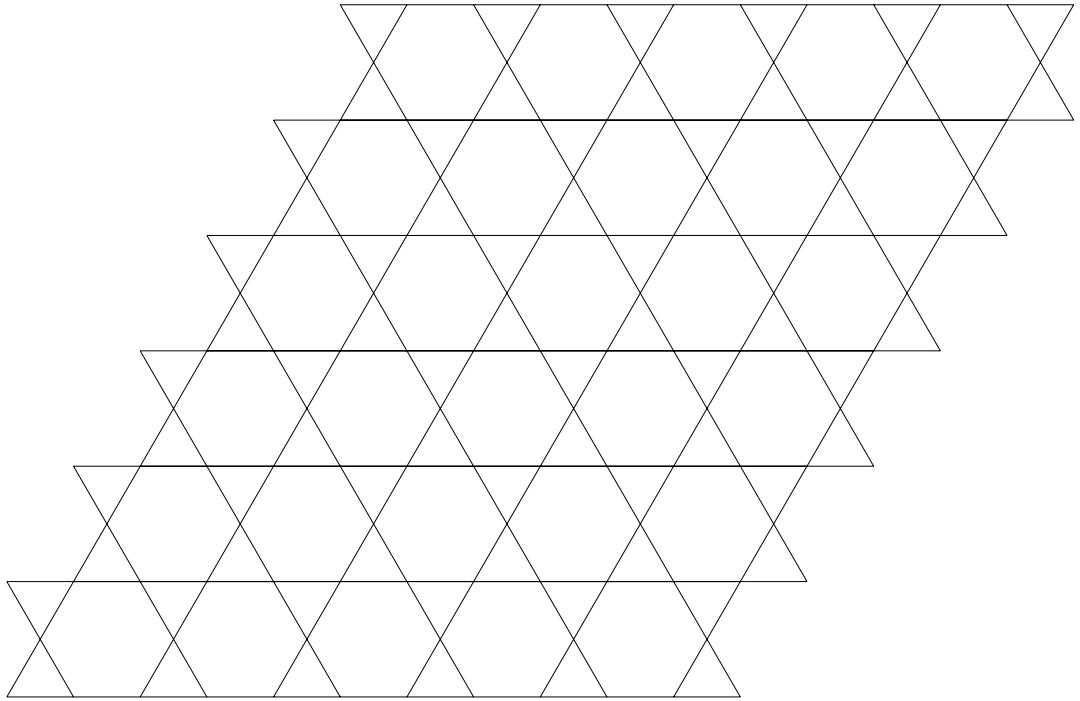
- Half-filling, ($\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow} = 1$): Model efektywny – *antyferromagnetyczny* model Heisenberga (Anderson, 1958). Na sieciach *dwudzielnych* (np. \mathbb{Z}^d): uporządkowanie *antyferromagnetyczne* (do chwili obecnej – brak ścisłego dowodu)
- Ferromagnetyzmu nie ma w stanie podstawowym najprostszego modelu Hubbarda w $d = 1$: Lieb, Mattis 1962



Rysunek 1: Gęstości stanów nieoddziałujących elektronów na sieci fcc.

W hamiltonianie Hubbarda:

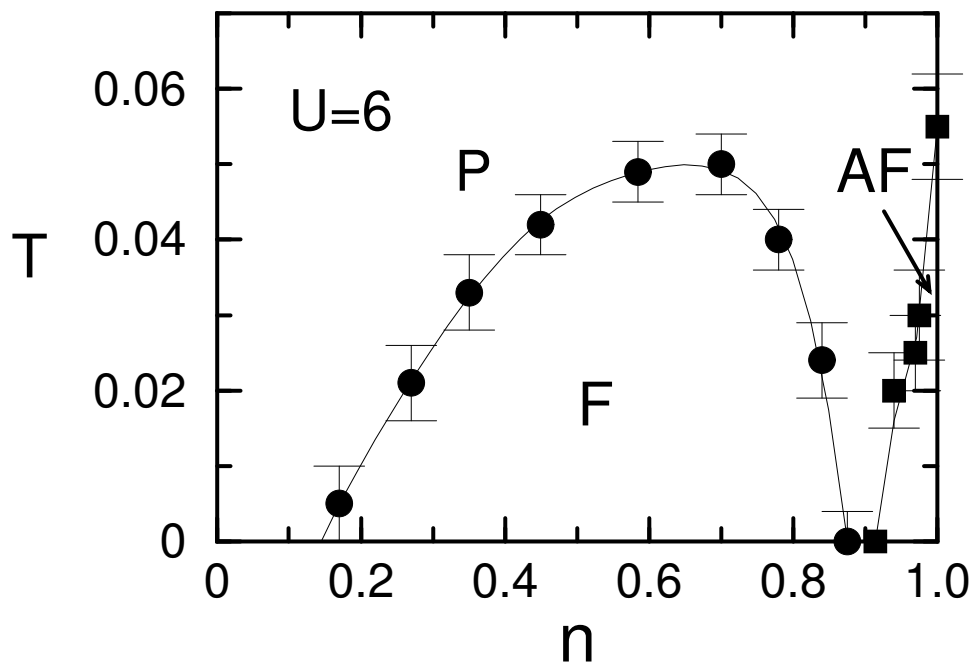
- Człon związany z oddziaływaniem: czysto lokalny, nieczuły na wymiar ani postać sieci
- Za ferromagnetyzm musi zatem być odpowiedzialny człon kinetyczny
- Czynniki sprzyjające FM:
 - sieć *sfrustrowana* (np. trójkątna) (aby zniszczyć uporządkowanie AFM),
 - wypełnienie różne od half-filling,
 - jak największa gęstość stanów w pobliżu granicy pasma ($E(\mathbf{k})$ "bezdyspersyjne", tzn. jak najbardziej "płaskie").



Rysunek 2: Sieć kagomé

Ścisłe uzasadnienie: lata 90.

Twierdzenie. (A. Mielke, H. Tasaki, '95) *Dwuwymiarowy model Hubbarda, na sieci kagomé, dla wypełnienia $1/6$, wykazuje nasycony ferromagnetyzm.*



Rysunek 3: Diagram fazowy modelu Hubbarda w ramach DMFT

Wyniki DMFT (M. Kollar, D. Vollhardt, ...) Dla sieci sfrustrowanych (np. fcc), ferromagnetyzm istnieje w szerokim zakresie parametrów.

FAZY WSTĘGOWE

W układach wykazujących nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe, często pojawiają się *wstęgi (stripes)* – jednowymiarowych uporządkowań ładunkowych i spinowych.

? Jakie są związki między tymi dwoma zjawiskami?

? Czy zrozumienie pojawiania się wstęg może pomóc w zrozumieniu nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego?

Wiele prób wyjaśnienia wstęg w ramach $d = 2$ modelu Hubbarda.

Wiele metod, wiele RÓŻNYCH konkluzji.

Prawdopodobnie: Stany wykazujące uporządkowanie "wstęgowe" i bez takiego uporządkowania mają bliskie energie, są więc bardzo czułe na błędy metod.

MODEL FALICOVA-KIMBALLA ('69):

Skrajnie "asymetryczny" model Hubbarda:

$$T_{\Lambda} = - \sum_{\langle x,y \rangle \in \Lambda; \sigma} t_{\sigma} c_{x;\sigma}^{\dagger} c_{y;\sigma} + \text{h.c.} \quad (4)$$

Asymetryczny model Hubbarda: stałe przeskoku zależą od spinu.

Model Hubbarda: $t_{\uparrow} = t_{\downarrow} = t$.

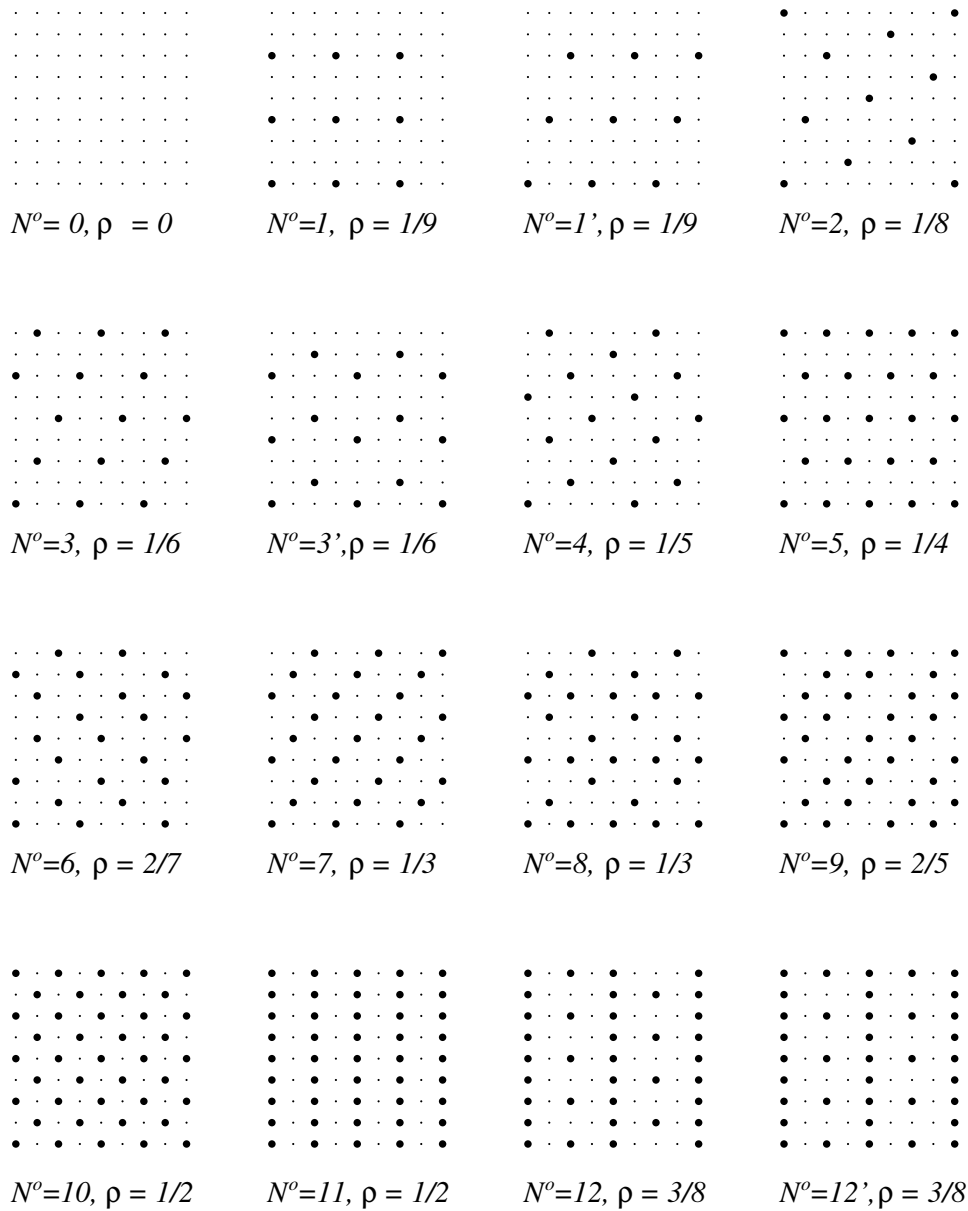
Model F-K: $t_{\uparrow} = 0, t_{\downarrow} = t$.

Model Falicova-Kimballa ("simplified Hubbard model")

W najprostszej wersji, model FK jest dalszy od rzeczywistości niż model Hubbarda; za to jest znacznie łatwiejszy do badania.

W modelu FK, wstęgi pojawiają się w szerokim zakresie parametrów! (P. Lemberger; J. Jędrzejewski; T. Kennedy; R. Lemański, J. Freericks, J.W.)

? Czy jest to przypadek, czy 'trop, którym należy podążać'?



Rysunek 4: Uporządkowania w stanie podstawowym w modelu FK z bliższym i dalszym przeskokiem elektronów. Uporządkowania faz: 7,9,12 można interpretować jako fazy wstępne

PODSUMOWANIE.

- Model Hubbard: "Working horse" dla teorii układów silnie skorelowanych elektronów
- Zbyt uproszczony, aby mógł służyć do opisu ilościowego
- prawdopodobnie fundamentalny, jeśli chodzi o *zrozumienie* zjawisk. Uporządkowania magnetyczne, przejście metal-izolator są dość dobrze zrozumiane, choć **ściślych dowodów** jest bardzo niewiele. Inne: nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe – "tyle wyjaśnień, ilu teoretyków zajmujących się tym" (N. F. Mott).

Prawdopodobnie, gdyż trudno poddaje się analizie
– zazdrośnie strzeże swych tajemnic.