مدل هابارد:

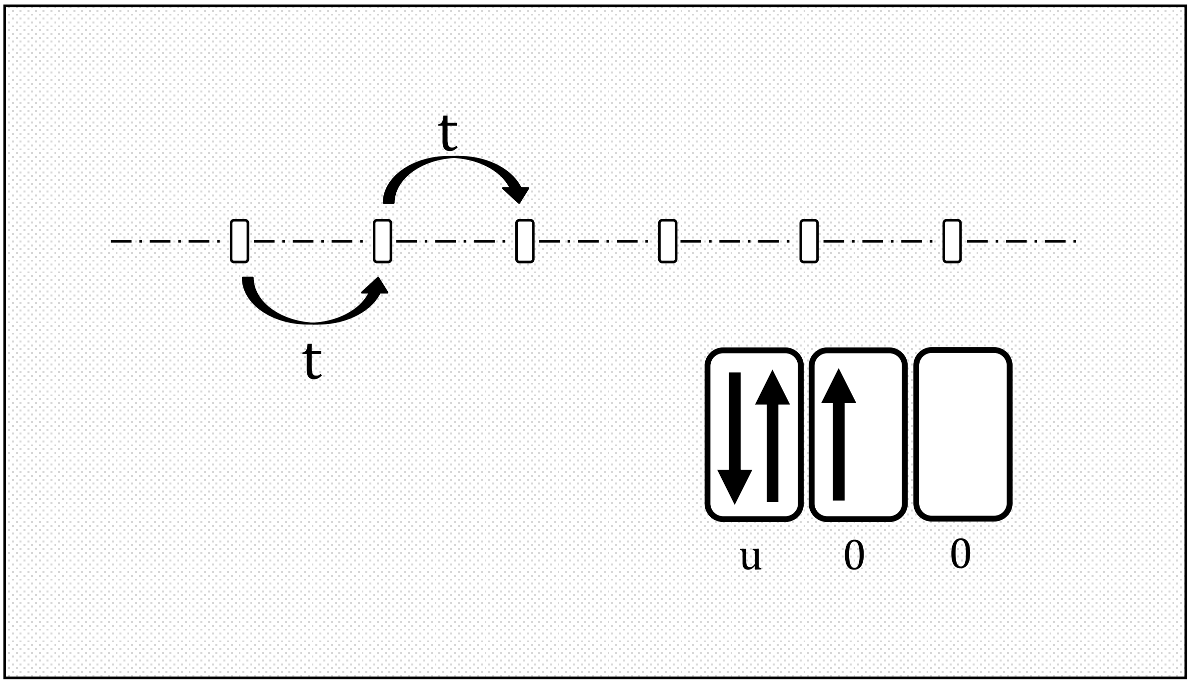
مدل هابارد یک مدل مهم در فیزیک ماده چگال نظری به ویژه در نظریه سیستم های الکترونی همبسته قوی است. بسیاری از تکنیک‌های بس ذره ای رایج مورد استفاده در فیزیک ماده چگال می تواند بر اساس این مدل توضیح داده شوند. همچنین برخی مفاهیم و ابزارهای نظری هستند که صرفا در این مدل کاربرد دارند. روش های تحلیلی این مدل همه تقریبی اند؛ به جز در برخی مسائل 1بعدی.

هامیلتونی هابارد: در شبکه بلور آرایه منظمی از هسته ها و تعداد بیشماری الکترون وجود دارد. در مدل هابارد برای سادگی هسته ها را ساکن فرض می کنیم و از برهم کنش کولنی بین هسته – هسته و بین هسته – الکترون صرف نظر می کنیم و برهم کنش کولنی الکترون – الکترون را تنها برای زمانی که دو الکترون در یک سایت قرار دارند غیر صفر در نظر می گیریم. زیرا بزرگترین برهم کنش کولنی بین دو الکترون زمانی اتفاق می افتد که هر دو در یک سایت باشند.این برهم کنش را با U نشان می دهیم.

در واقع با شبکه ای از اتم ها(سایت) سر و کار داریم که الکترون ها در آن حرکت می کنند. هر کدام از این اتم ها ساختار پیچیده و سطوح انرژی متفاوتی دارند. با این وجود در اینجا مساله را ساده تر در نظر می گیریم. یک سطح انرژی برای هر سایت که اصل طرد پائولی برای آن صادق است. هر الکترون فقط اجازه دارد به همسایه اول پرش کند(برانگیخته شود). اندازه این برانگیختگی را با t نشان می‌دهند که از برهم نهی توابع موج مربوط به هر الکترون مشخص می شود. از آن جایی که توابع موج به صورت نمایی افت می کنند، ما این مطلب را در نظر می گیریم که فقط برانگیختگی برای نزدیکترین همسایه هاست.

$$H = -t\sum_{\langle l,j\rangle,\sigma} c_{l\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U\sum_{j} c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}$$

در مدل هابارد هامیلتونی را بر اساس عملگرهای خلق و فنای فرمیونی می نویسند و عملگرها را با اندیس های j وσ از یکدیگر متمایز می کنند. اندیسj به مکان ذره و اندیسσ به اسپین الکترون اشاره دارد. عبارت $\langle l, j \rangle$ به معنای همسایگی سایت های lام و jام است.



جمله انرژی جنبشی در فضای تکانه:

$$H=-t\sum_{<l,j>,\sigma} c_{l\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma} \quad ,c_{l\sigma}^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k} e^{-ikl}\, c_{k\sigma}^{\dagger} \quad ,c_{j\sigma}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{m} e^{imj}\, c_{m\sigma}$$

$$\Longrightarrow \quad H=-t\sum_{<l,j>,\sigma}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k} e^{-ikl}\, c_{k\sigma}^{\dagger}.\ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{m} e^{imj}\, c_{m\sigma}$$

$$=\frac{-t}{N}\sum_{<l,j>,\sigma}\sum_{k}\sum_{m} e^{i(mj-kl)}\, c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{m\sigma}\ ,\begin{cases} j=l+1 \\ j=l-1\end{cases}$$

$$=\frac{-t}{N}\sum_{l,\sigma}\sum_{k}\sum_{m} e^{i(m(l+1)-kl)}\, c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{m\sigma}+\frac{-t}{N}\sum_{l,\sigma}\sum_{k}\sum_{m} e^{i(m(l-1)-kl)}\, c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{m\sigma}$$

$$=\frac{-t}{N}\sum_{l,\sigma}\sum_{k}\sum_{m} e^{i(m-k)l}\, e^{im}\, c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{m\sigma}+\frac{-t}{N}\sum_{l,\sigma}\sum_{k}\sum_{m} e^{i(m-k)l}\, e^{-im}\, c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{m\sigma}$$

با استفاده از رابطه: $\frac{1}{N}\sum_{l} e^{i(m-k)l}=\delta_{m,k}$ به دست می آید:

$$=-t\sum_{k,\sigma} e^{ik}c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{k\sigma}\ +\ -t\sum_{k,\sigma} e^{-ik}c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{k\sigma}$$

$$=t\sum_{k,\sigma}\left(e^{ik}+e^{-ik}\right)c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{k\sigma}\ =\sum_{k,\sigma}(-2t\cos k)\, c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{k\sigma}\ =\sum_{k,\sigma}\epsilon_{k}c_{k\sigma}^{\dagger}\, c_{k\sigma}$$

و $\epsilon_k=2t\cos k$

در فضای تکانه هر دو عملگر خلق و فنا اندیس k دارند. بدین معنا که در فضای تکانه در غیاب برهم کنش($U=0$) مدهای مختلف از حالت جفت شده بودن خارج می شوند و می توانند به صورت مستقل رفتار کنند. اما در فضای حقیقی که اندیس عملگرهای خلق و فنا به دو سایت مختلف اشاره می کرد سایت های مختلف با یکدیگر مخلوط می شدند.

جمله برهم کنشی در فضای تکانه:

$$H_1 = U\sum_j c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}$$

$$c_{j\downarrow}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_1} e^{-ik_1 j}\ c_{k_1\downarrow}^{\dagger}\ , c_{j\uparrow}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_2} e^{-ik_2 j}\ c_{k_2\uparrow}^{\dagger}$$

$$, c_{j\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_3} e^{ik_3 j}\ c_{k_3\uparrow}\ , c_{j\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_4} e^{ik_4 j}\ c_{k_4\downarrow}$$

$$\Rightarrow H_1 = U\sum_j \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_1} e^{-ik_1 j}\ c_{k_1\downarrow}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_2} e^{-ik_2 j}\ c_{k_2\uparrow}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_3} e^{ik_3 j}\ c_{k_3\uparrow} \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k_4} e^{ik_4 j}\ c_{k_4\downarrow}$$

$$= \frac{U}{N^2}\sum_{\substack{j,k_1,k_2\\k_3,k_4}} e^{i(k_3+k_4-k_1-k_2)j} c_{k_1\downarrow}^{\dagger}\ c_{k_2\uparrow}^{\dagger} c_{k_3\uparrow} c_{k_4\downarrow}$$

با استفاده از رابطه $\frac{1}{N}\sum_j e^{i(k_3+k_4-k_1-k_2)j} = \delta_{k_3+k_4,k_1+k_2}$ به دست می آید:

$$= \frac{U}{N}\sum_{\substack{k_1 k_2\\k_3}} c_{k_1\downarrow}^{\dagger}\ c_{k_2\uparrow}^{\dagger} c_{k_3\uparrow} c_{(k_1+k_2-k_3)\downarrow}$$

مفهوم فیزیکی این عبارت این است که یک الکترون با اسپین پایین و یک الکترون با اسپین بالا با تکانه های $k_1 + k_2 -$ k_3 و k_3 پراکنده و با تکانه های k_2 و k_1 دوباره ظاهر می شوند. به گونه ای که تکانه کل پایسته می‌ماند. می توان این عبارت را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H_1 = \frac{U}{N}\sum_{k,p,q} c_{p+q\downarrow}^{\dagger}\ c_{k-q\downarrow}^{\dagger} c_{p\uparrow} c_{k\downarrow}$$

دو الکترون با تکانه های k و p پراکنده می شوند؛ به گونه ای که از تکانه یکی به اندازه q کاسته شده و به تکانه دیگری به اندازه q افزوده شده است.[6]