

## 致 謝

在東海七年感謝 上帝帶領我在這裡經歷如此豐富。謝謝陳永忠老師包容我的青澀無知，不厭其煩一而再而三的叮嚀，在研究上傾囊相授親自成為榜樣，讓我認識嚴謹治學的態度，並可以略略窺見凝態物理的趣味。謝謝？峻學長之前的研究工作，祥軒的抵礪，實驗室的弘吉和郁欽學弟，陪我一起在霧裡中摸索，細心的收集每一次課堂的資料，謝謝林姐的關心和叮嚀。

謝謝撒母耳小組的家長劉老師、師母以及弟兄姐妹，陪我一起成長。研究生小組的黃哥鄔姐，同是研究生的戰友，謝謝瑩真一直的陪伴、激勵、禱告、安慰。最感謝的是我的父母，全力支持我完成學業，將本文獻給他們。

## 中文摘要

在本文中主要使用精確對角化及變分蒙地卡羅法來研究一維強關聯電子模型的基態性質。我們研究的模型包括:Hubbard 模型、 $t$ - $J$  模型、 $t$ - $J$ - $V$  模型及  $t$ - $J$ - $U$  模型。

本篇論文將簡介 Mott 金屬-絕緣體相變 P.W. Anderson 為了解釋高溫超導機制所提出的 RVB (Resonating Valence Bond)理論以及在一維強關聯系統中很重要的 Tomonaga-Luttinger 液體理論等在強關聯系統中許多重要的觀念和理論。我們的數值結果發現，這些一維的強關聯模型都符合這些理論所描述的基本性質，更加深了我們對這類模型的研究興趣。我們主要的研究結果包括各種模型的低能量激發，特別是自旋能隙，還有自旋關聯函數，電荷關聯函數以及各種模型的相圖。

## **Abstract**

We study several strong correlated electronic models: Hubbard model, t-J model, t-J-V model and t-J-U model with Lanczos method and Variation Monte Carlo Method.

We will introduce Mott Metal-insulator transition, RVB (Resonating-Valence-Bond) theory proposed by P.W Anderson and Tomonaga-Luttinger liquid. Our numerical results show that those one-dimensional strongly correlated electronic models are consistent with those theories which we mentioned. So that inspires us to research for this kinds of models. The main results of our research are low energy excitation especially for spin gap phase, spin and charge correlation and phase diagrams of those models.

# 目 錄

<b>第 1 章 緒論</b> .....	<b>1</b>
1.1 前言.....	1
1.2 Mott 金屬-絕緣體相變(Mott metal -insulator transition).....	1
1.3 Hubbard 模型與 t-J 模型.....	4
1.4 RVB 理論與自旋液體(spin liquid).....	7
1.5 一維強關聯模型理論.....	10
1.6 自旋能隙(spin gap) .....	11
<b>第 2 章 研究方法</b> .....	<b>14</b>
2.1 精確對角化(Exact diagonal).....	14
漢米爾頓矩陣和數值編碼 .....	14
Lanczos Method.....	17
2.2 變分蒙地卡羅法(Variational Monte Carlo,VMC) .....	19
2.3 強關聯模型的嘗試波函數.....	22
Gutzwiller 波函數 .....	27
HM 波函數.....	27
<b>第 3 章 Hubbard 與 t-J 模型的數值結果</b> .....	<b>29</b>
3.1 Hubbard 模型.....	29
單電子動量分佈(single particle momentum distribution) .....	32
自旋結構因子(spin structure factor).....	34

電荷結構因子(Charge Structure factor) .....	36
Gutzwiller 波函數的結果 .....	38
強關聯極限 .....	40
<b>3.2 t-J 模型.....</b>	<b>42</b>
能量 .....	42
相分離態(Phase separation) .....	43
結構因子(spin structure factor).....	45
臨界指數(Critical exponent) .....	47
VMC 的數值結果 .....	49
自旋單態配對波函數(Singlet Pair Wave function).....	50
自旋能隙相(spin gap phase) .....	52
相圖 .....	54
<b>第 4 章 t-J-V 與 t-J-U 的數值結果.....</b>	<b>55</b>
<b>4.1 t-J-V 模型 .....</b>	<b>55</b>
<b>4.2 t-J-U 模型 .....</b>	<b>62</b>
自旋結構因子(Spin Structure factor) .....	63
電荷結構因子(Charge structure factor).....	64
單電子動量分佈(Momentum distribution) .....	65
<b>第 5 章 結論.....</b>	<b>68</b>
<b>參考文獻 .....</b>	<b>70</b>

## 表 目 錄

表 3.1	Hubbard 模型基態能量能量圖 $N_a=12$ .....	30
表 3.2	$N_a=12$ $N_e=6$ 的最佳嘗試能量與基態能量.....	40
表 3.3	1D t-J 模型 $N_a=16$ 能量.....	42

## 圖 目 錄

圖 1-1 金屬與絕緣體能帶示意圖 .....	2
圖 1-2 $La_2CuO_4$ 之銅氧平面示意圖.....	3
圖 1-3 $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ 的相圖 .....	8
圖 2-1 嘗試波函數與真實基態關係圖 .....	21
圖 3-1 Hubbard 模型 $N=12$ 基態能量 .....	31
圖 3-2 Hubbard 模型的單電子動量分佈 .....	33
圖 3-3 $3+3/12$ $2k_F$ 示意圖 .....	34
圖 3-4 Hubbard 模型的自旋結構因子 .....	35
圖 3-5 Hubbard 模型的電荷結構因子 .....	37
圖 3-6 (a) $U=1$ (b) $U=10$ (c) $U=100$ 嘗試能量對調變參數 $g$ 作圖....	39
圖 3-7 $U$ 對最佳調變參數 $g^*$ 作圖.....	39
圖 3-8 $U$ 對最佳嘗試能量 $E^*$ 作圖 .....	40
圖 3-9 哈柏模型和 t-J 模型的能量比較圖 .....	41
圖 3-10 1D $N=16$ t-J 模型單位晶格能量圖 .....	43

圖 3-11 壓縮係數的倒數對 $J$ 作圖 .....	44
圖 3-12 $t$ - $J$ 模型的相分離邊界 .....	45
圖 3-13 $t$ - $J$ 模型之電荷結構因子 .....	46
圖 3-14 $N_a=16$ 、 $J=2$ $t$ 臨界指數與電荷傳播速度 .....	48
圖 3-15 $N_a=16$ 、 $J=3$ $t$ 臨界指數與電荷傳播速度 .....	48
圖 3-16 Ogata 得到的 $t$ - $J$ 模型的相圖 .....	49
圖 4-1 $t$ - $J$ - $V$ 模型在 $V=1$ 時基態能量 .....	55
圖 4-2 $t$ - $J$ - $V$ model 相圖 .....	56
圖 4-3 $t$ - $J$ - $V$ 模型相圖 ( $V=1$ ) .....	57
圖 4-4 $t$ - $J$ - $V$ 模型之相圖 ( $V=3$ ) .....	57
圖 4-5 $4+4/16$ ( $V=1$ ) 自旋與電荷結構因子 .....	58
圖 4-6 $t$ - $J$ - $V$ ( $V=1$ ) 的 $P(k)$ .....	59
圖 4-7 $4+4/16$ ( $V=3$ ) 自旋與電荷結構因子 .....	60
圖 4-8 $t$ - $J$ - $V$ ( $V=3$ ) 的 $P(k)$ .....	61
圖 4-9 $t$ - $J$ - $U$ 模型能量分佈 ( $U=20$ ) .....	62



圖 4-10	t-J-U 模型之自旋結構因子.....	63
圖 4-11	t-J-U 模型之電荷結構因子.....	64
圖 4-12	t-J-U 模型之單電子動量分佈.....	66
圖 4-13	t-J-U model 相分離邊界 .....	67

# 第 1 章 緒論

## 1.1 前言

近二十年來在凝體物理界一直有個熱門的話題，就是「強關聯系統」(strongly correlated system)，本篇論文主要針對這類強關聯系統作數值方法方面的研究，在這一章裡我們將簡介 Mott 金屬-絕緣體相變、1987 年 P.W. Anderson 為了解釋高溫超導機制所提出的 RVB (Resonating Valence Bound) 理論等重要的課題。此外我們也將介紹為了研究強關聯系統而引入的 Hubbard 模型、t-J 模型。

## 1.2 Mott 金屬-絕緣體相變(Mott metal-insulator transition)

能帶理論是可以成功的解釋材料為什麼能形成金屬、絕緣體以及半導體的理論<sup>1</sup>。在基態( $T=0K$ )時，絕緣體有完全填滿的價帶(valence band)和完全空的傳導帶(Conduction band)，當外加電壓時，絕緣體的價帶上的電子無法躍過帶間的能隙，成為傳導電子，所以無法導電；反之，金屬的傳導帶因為未完全填滿，電子在傳導帶上可以傳導，所以能夠導電。

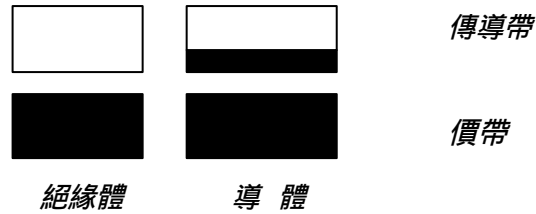


圖 0-1 金屬與絕緣體能帶示意圖

能帶理論假設，電子間沒有庫倫交互作用，或是將電子間交互作用視為很微小，因為在一般的導電材料中，外層的電子是在 S 軌域，這些電子的波函數都是很拓展的(extended)，加之以？立不相容原理的排斥性，傳導電子能夠適當的避開彼此間的庫倫交互作用，所以能帶理論能夠成功的適用。

相對的在解釋一些窄帶(narrow band)材料例如:過渡金屬(transition metal)時，因為所貢獻的導電電子具有局域性(localized)，受到庫倫斥力的影響很大，能帶理論發生困難如:高溫超導材料、及巨磁阻(Colossal-Magneto-Resistance, CMR) 材料。以高溫超導材料  $La_2CuO_4$  為例，此材料最重要的組成是圖 0-2 所示的銅氧平面

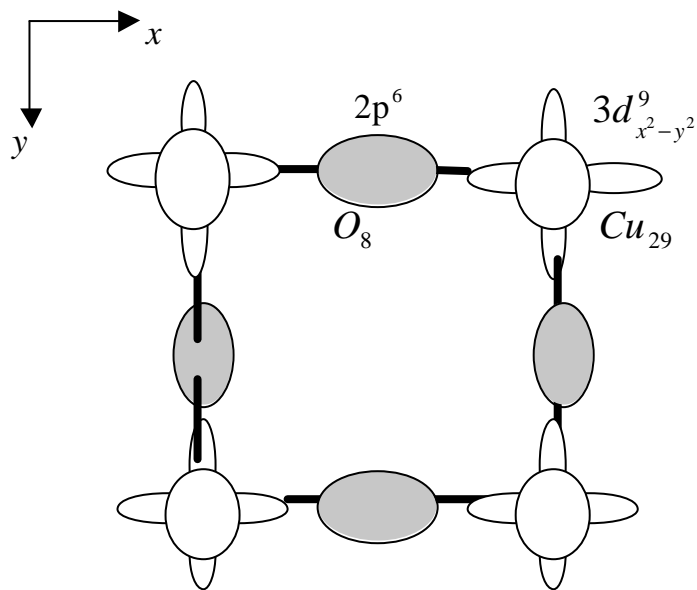


圖 0-2  $La_2CuO_4$  之銅氧平面示意圖

在銅氧平面中，原本電中性的 Cu 原子佔據  $[Ar]3d^{10}4s^1$  軌域，與氧化合之後給出兩個電子，形成  $[Ar]3d^9$  的組態，因此有一個電洞在銅原子上。半填滿的能帶，由能帶理論中預測是金屬，但在實驗上卻顯示此化合物是絕緣體，並且還有反鐵磁性。

能帶理論失敗的原因在於，當我們的模型必須考慮到使用內層 d 軌域的電子時，庫倫交互作用力所產生的排斥位能會大於電子跳躍時所減少的動能，所以即使有未填滿的價帶，電子也不會選擇跳躍過去，Cu 保持  $[Ar]3d^9$  組態，這種因很強的庫倫排斥力而形成的絕緣體稱為 Mott 絕緣體；至於反鐵磁性的物理原因則可根據微擾理論來定性解釋，在下一個小節討論哈柏模型中我們有較詳細的推導。

### 1.3 Hubbard 模型與 t-J 模型

1960 年代物理學家為了解決具有強庫倫交互作用的問題而提出了 Hubbard 模型。電子在很窄的能帶裡，於最近鄰晶格點的 Wannier States 之間跳躍，當相反自旋的兩個電子佔據同一個晶格點時，庫倫斥力的交互作用會使得系統的位能上升，此模型就是所謂的 Hubbard 模型或稱 t-U 模型<sup>2,3</sup>。漢米爾頓量如下：

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle s} (c_{is}^+ c_{js} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \dots\dots\dots (0.1)$$

為了對 Hubbard 模型有一個基本的認識，我們分別考慮  $t \gg U$  以及  $U \gg t$  的兩個極限下，此模型的基本性質<sup>4</sup>。

當  $t \gg U$  時，稱為「弱關聯極限」(Weak coupling limit)，漢米爾頓量可以簡化為只有動能項。我們考慮在一維下，將漢米爾頓量作傅立葉轉換到動量空間：

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_i (c_{is}^+ c_{(i+1)s} + c_{(i+1)s}^+ c_{is}) \\ &= -t \frac{1}{N_a} \sum_{kk'} \left\{ \sum_i^{N_a} \left[ (e^{i(k-k')R_i} e^{-ik'}) + (e^{i(k-k')R_i} e^{ik}) \right] \cdot c_{ks}^+ c_{k's} \right\} \\ &= -t \sum_{kk'} \left[ d_{kk'} \cdot (e^{-ik} + e^{ik'}) \right] \cdot c_{ks}^+ c_{k's} \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2p} \sum_i^{N_a} e^{i(k-k')R_i} = d_{kk'} \text{ 為 kronecker Delta function.}$$

$$H = -2t \sum_k (\cos k) \cdot c_{kS}^+ c_{kS} \dots\dots\dots (0.2)$$

電子氣體之間的交互作用極弱時，等同於自由電子費米氣體。

當  $t=0$  時，稱為強關聯極限(Strong Coupling limit)，在電子密度接近半填滿時，是特別而且重要的。我們先以兩個晶格兩個電子為例，以量子力學方法來計算系統的能量，得到漢米爾頓量可能存在的 4 個非簡併本徵態為  $|\uparrow, \uparrow\rangle$ 、 $|\uparrow, \downarrow\rangle$ 、 $|\downarrow, \downarrow\rangle$ 、 $|\downarrow, \uparrow\rangle$ ，它們所對應的本徵能量都為 0。當  $t \neq 0$ ， $U \gg t$  時，電子存在跳躍的可能，我們將這 4 個本徵態分成平行與反平行兩類，並且用微擾理論的計算，試圖找出系統對應於這兩類本徵態何者的能量較低。

$$H|\mathbf{y}\rangle = W|\mathbf{y}\rangle$$

$$H = H_0 + H'$$

$$H_0 = U \sum_{i,S} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$H' = -t \sum_{i,S} (c_{iS}^+ c_{iS} + h.c.)$$

(1) 對於自旋平行  $|\mathbf{y}_0\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle$

$$H_0|\uparrow, \uparrow\rangle = 0 \quad W_0 = 0$$

由於 Pauli 不相容原理使得相互平行的自旋不能因跳躍而佔據同一個晶格點，其一階和二階修正能量皆為零。

(2)對於自旋反平行 $|\mathbf{y}_0\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$

$$H_0|\uparrow, \downarrow\rangle = 0 \quad W_0 = 0$$

$$\text{一階修正能量} \quad W_1 = -t\langle\uparrow, \uparrow|\uparrow\downarrow, 0\rangle - t\langle\uparrow, \uparrow|0, \uparrow\downarrow\rangle = 0$$

$$\text{二階修正能量} \quad |\mathbf{y}_1\rangle = \sum \frac{t}{U}|\uparrow\downarrow, 0\rangle + \frac{t}{U}|0, \uparrow\downarrow\rangle$$

$$W_2 = 2 \times \left( \frac{t^2}{0 - U} \right) = -\frac{2t^2}{U}$$

當  $U \gg t$  時，由微擾理論的計算告訴我們，自旋反平行的組態會有二階的修正能量  $-2t^2/U$ ，比自旋同方向時來的低，這樣的結果似乎與反鐵磁的基態一致，近臨之間自旋反平行排列可以增加一些 virtual hopping 的機會，因而能使能量降低。然而兩個粒子的計算只是提供一個簡單的物理圖像。在 Hubbard 模型中， $U$  很大時，自旋喜歡反平行排列。但對於在多體理論裡，基態是否具有反鐵磁長程序仍然需要更深入的探討。

由以上計算我們知道在半填滿而且  $U$  很大時，系統是絕緣體，但是否  $U$  下降到一定值  $U_c$  時系統就成為導體？這是一個很重要的問題。1968 年 Lieb and Wu 精確解了一維 Hubbard 模型<sup>5</sup>。他們的主要結論是：在一維時，只有在半填滿且  $U=0$  時為金屬，但在  $U \neq 0$  馬上成為絕緣體，在基態是反鐵磁性。當電子不是半填滿時，在所有的  $U$  都是金屬。很遺憾的，在一維的 Hubbard 模型只要在有限  $U$  下就是絕緣體，並不存在我們所想要的 Mott 金屬-絕緣體相變(Mott transition)，即  $U$  在大於某個有限非零的  $U_c$  時成為絕緣

體，當然這是一維 Hubbard 模型的結果，並不表示在二維以上不存在 Mott 金屬-絕緣體相變。

為了研究高溫超導，物理學家將強關聯極限下( $U \gg t$ )的 Hubbard 模型，加上不允許雙佔據的限制，再利用類似上述的微擾理論的分析進而提出了 t-J 模型，其漢米爾頓量為：

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle s} (c_{is}^+ c_{js} + h.c.) + J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i \cdot n_j) \dots\dots\dots (0.3)$$

#### 1.4 RVB 理論與自旋液體(spin liquid)

許多高溫超導材料都具有如圖 1-3 的相圖，例如在 1986 年第一個發現的高溫超導材料  $La_2CuO_4$  在還沒摻雜任何電洞前，也就是在半填滿的狀態下，是反鐵磁絕緣體。當我們摻雜+2 價的 Sr(相當於摻雜電洞) 成為  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ，在  $T=0$ ，當 Sr 的濃度達到 4%，反鐵磁絕緣體就會被破壞掉成為金屬，5% ~ 30% 間有超導態，15% 為最佳？雜，此時有最高的臨界溫度  $T_c$  約為 39k。



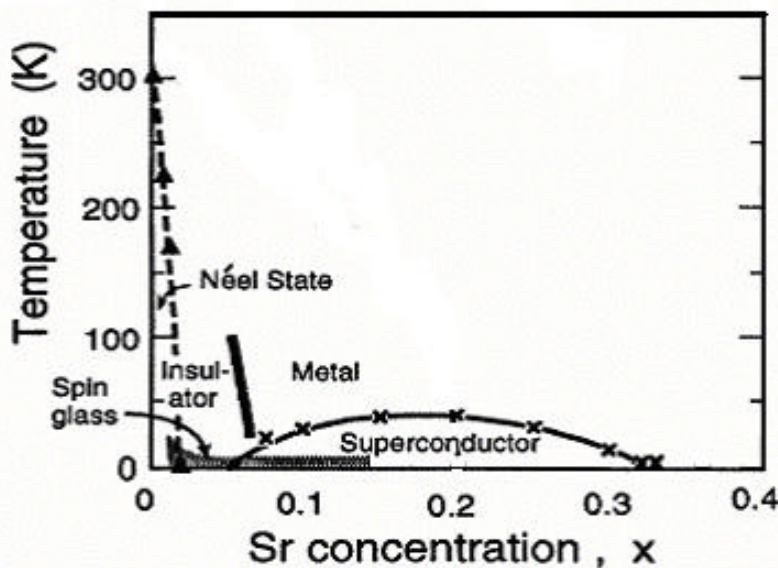


圖 0-3  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  的相圖

由於在材料中發現有很強的晶格異向性，在銅氧平面內有很強的耦合，而在銅氧平面間的耦合比較弱，這整個問題我們可以約化到兩維來考慮：為何在二維半填滿時具有反鐵磁關聯的電子模型中，摻雜電子或電洞就可以使系統產生超導基態？1987年，P.W. Anderson 在 Science 發表了著名的 RVB(Resonating-Valence-Bond)理論<sup>7</sup>。他認為在二維半填滿的 Hubbard 或  $t$ -J 模型即為反鐵磁海森堡模型，其基態應是所謂的 RVB 態，不具有反鐵磁長程序。由 Hubbard 模型， $U \rightarrow \infty$ 時可以用來理解 Mott 絕緣體以及材料的反鐵磁性，此時 Hubbard 模型的行為就近似自旋 $\frac{1}{2}$ 的海森堡模型，其漢米爾頓量

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \dots\dots\dots (0.4)$$

Anderson 的 RVB 理論指出，在 Hubbard 模型半填滿 $U \rightarrow \infty$ 的基態，每

一個自旋都與另一個自旋呈現自旋單態(singlet)的耦合，並且存在很大的漲落(fluctuation)，有所謂共振的情形(resonating)，而整體呈現順磁性的狀態。

RVB 理論指出，當我們在半填滿的系統中摻雜電洞後，這些已經配對的電子就有機會可以跳動，形成 Copper 對，就是超導電流的機制。二維的海森堡模型基態是反鐵磁長程序<sup>8</sup>，雖然不是 RVB 態，但 RVB 態仍是不錯的激發態，若將電洞放入海森堡模型，RVB 是否就成為好的基態？這是接下來研究的問題。RVB 態描述的事實上是一種自旋液體(spin liquid)的行為，廣義的來說，自旋液體包括下列兩種：一種是有很長的自旋關聯的自旋液體，其自旋關聯函數呈冪次方(power law)函數，並且不存在自旋能隙；另一種是具有自旋能隙，而其自旋關聯函數呈指數衰減(exponential decay)，因此具有有限的關聯長度(finite spin correlation length)。這種具有短程自旋關聯的系統，其近鄰的電子之間存在很強的自旋配對的性質<sup>9</sup>。

不管是哪一種自旋液體，總的來說 RVB 理論給人最大的啟示就是：當一個系統在半填滿的基態，只有「自旋自由度」(spin degree of freedom)時，自旋與自旋之間已經被配對了，藉由摻雜使得自旋有了「電荷自由度」(charge degree of freedom)，而自旋能隙仍然存在，這個自旋能隙就有可能轉變為超導能隙，進而形成超導的機制。

## 1.5 一維強關聯模型理論

雖然我們所關注的高溫超導問題中最有興趣的是二維銅氧平面，因此二維的 Hubbard 或  $t$ - $J$  模型才是直接相關的模型，然而當我們以數值方法來作二維模型的計算，具有下述的諸多困難，因此我們必需採取其它策略。以精確對角化方法來求有限晶格的精確解時，對計算機的需求是大量的記憶體，因此我們所能研究的晶格非常小，這對我們想要研究熱力學極限的相關問題是非常困難的；另一方面，在大晶格的數值計算上有所謂量子蒙地卡羅法(Quantum Monte Carlo, QMC)，然而 QMC 在研究二維費米子模型存在嚴重的負號問題，使得我們沒有辦法得到精確的數值結果。基於這些困難，我們採用一維的模型來研究與高溫超導相關的強關聯模型，希望藉由一維的數值結果，來幫助我們推廣到二維的可能結果。

此外一維模型中在解析方法中有保角場論(Conformal field theory) 弱關聯重整化群(weak coupling renormalization group)，在部分的一維模型中有 Beth-Ansatz 的精確解，在數值方法上有 DMRG，這些都提供我們在研究上的參考。

近年來由於材料科學的蓬勃發展，奈米科技中操縱原子的技術，使人們能合成一維的量子線等準一維的材料，相信一維模型的計算不僅對於理論上有貢獻，在應用上也有可期待的發展。

無論是一維的 Hubbard 模型的精確解或是 t-J model 在  $J=0$  和  $2t$  時有精確解<sup>10</sup>，以及弱關聯重整化群的解析計算，使我們認識到一維強關聯模型具有與費米液體完全不同的固定點(fixed point)，即所謂的 Tomonaga-Luttinger 液體(TLL)，其關聯函數隨著臨界指數  $K_r$  呈冪次方衰減 (power law decay)<sup>11</sup>。例如自旋關聯函數  $s(r)$ 、單態電子對關聯函數  $P(r)$ :

$$S(r) = \langle S^z(r) \cdot S^z(0) \rangle \propto \cos(2k_F r) \cdot r^{-(1+K_r)} \dots\dots\dots (0.5)$$

$$\langle n(r)n(0) - n^2 \rangle \propto \cos(2k_F \cdot r) \cdot r^{-(1+K_r)} \dots\dots\dots (0.6)$$

$$P(r) = \langle b^+(r)b(0) \rangle \propto r^{-(1+\frac{1}{K_r})} \dots\dots\dots (0.7)$$

$K_r > 1$ 時，單態電子對關聯函數  $P(r)$  會主導，這時候系統的超導比較強  $K_r = 1$  時，為費米液體。系統是  $K_r < 1$ 時，自旋關聯函數主導，自旋之間的關聯性比較強<sup>12</sup>。

## 1.6 自旋能隙 (spin gap)

自旋能隙存在對於高溫超導扮演著關鍵的角色<sup>13,14</sup>，在半填滿(還未摻雜電洞)狀態下已經有一些模型存在著自旋能隙，在此有比較多發生超導的機會。以下簡介三個模型<sup>15</sup>:

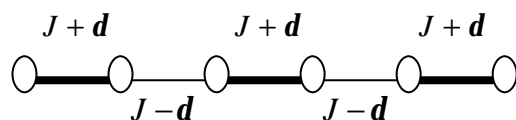
### 1. 一維 J-J' 模型 <sup>16</sup>

$$H = J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + J' \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2} \dots \dots \dots (0.8)$$

當  $J'/J > 0.241$  , 一維 J-J' 模型存在自旋能隙。

### 2. 一維交錯模型 <sup>17</sup>

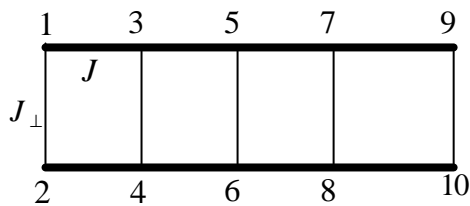
$$H = J(1+d) \sum_{i=0}^{N_a/2-1} \vec{S}_{2i+1} \cdot \vec{S}_{2i+2} + J(1-d) \sum_{i=0}^{N_a/2-1} \vec{S}_{2i+2} \cdot \vec{S}_{2i+3} \dots \dots \dots (0.9)$$



在這個模型中 , 當  $d \neq 0$  時 , 一維交錯模型存在自旋能隙。

### 3. 樓梯模型 <sup>18</sup>

$$H = J_{\perp} \sum_{i=1}^{N_d=N_a/2} (\vec{S}_{2i-1} \cdot \vec{S}_{2i}) + J \sum_{i=1}^{N_a} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}) \dots \dots \dots (0.10)$$



當  $J_{\perp} \neq 0$  時 , 樓梯模型有自旋能隙。

若在上述模型中摻雜電洞 , 即成為  $t-J-J'$  模型、 $t-J-d$  模型、  
 $t-J-ladder$  模型。在摻雜後還能存在自旋能隙 , 則自旋能隙有可能轉變為

超導能隙。另外一種情況是，系統本來就有電荷自由度，然後因為很強的  $J$  作用下，電子被配對在一起成為自旋單態，這時候若激發這個單態電子對就會使能量上升，也會產生能隙。

關於自旋能隙與超導之間的關係也是本篇論文中所關切的重點。本文中第二章介紹研究的方法、以及強關聯系統的波函數，第三章重複一些文獻中 Hubbard 模型  $t$ - $J$  模型的數值的結果，第四章呈現我們研究  $t$ - $J$ - $V$ 、 $t$ - $J$ - $U$  模型的數值結果、第五章對我們研究的結果做整理，以及未來需要繼續的研究工作。

## 第2章 研究方法

在這一章中我們介紹兩套研究方法，第一套稱為「精確對角化(exact diagonal)」或是 Lanczos 方法<sup>19,20</sup>，利用量子力學的定義，在有了模型的漢米爾頓量之後，我們寫下一個漢米爾頓矩陣，並利用 Lanczos 方法將矩陣三對角化求得系統的基態能量、基態波函數。精確對角化的方法對於觀察小尺度的系統有良好的物理結果<sup>21</sup>，但也因為記憶體的限制，只能研究小晶格的問題。

第二套數值方法為「變分蒙地卡羅法(variational monte carlo method)」，變分的方法提供我們的好處是可以研究較大的系統，在選擇嘗試波函數時可以更深入的了解系統基態的物理內涵，然而其缺點是其所選擇的嘗試波函數可能與真實基態仍有相當的差距。

### 2.1 精確對角化(Exact diagonal)

#### 漢米爾頓矩陣和數值編碼

我們以 Hubbard 模型為例，其漢米爾頓量如方程式(1.1)

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle s} (c_{is}^+ c_{js} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Hubbard 模型的基底向量是建構在「粒子數算符(number operator)」

$n_{is} = c_{is}^+ c_{is}$  的基底向量上，以由右到左的順序來描述一個狀態

$$|\mathbf{a}\rangle = \prod_i |n_{i\uparrow}\rangle \otimes |n_{i\downarrow}\rangle \dots\dots\dots (2.1)$$

在程式中我們使用 4 進位法來表達每個晶格可有的四種狀態:

代碼	0	1	2	3
狀態	$ \downarrow\rangle$ 自旋下	$ 0\rangle$ 空佔據	$ \uparrow\rangle$ 自旋上	$ \#\rangle$ 雙佔據

例如: 四個晶格點，有四個自旋如下



在程式中記法為  $|\mathbf{a}\rangle = |2\rangle \otimes |0\rangle \otimes |3\rangle \otimes |1\rangle = |2031\rangle$

以兩個晶格點為例，考慮半填滿狀態我們以  $M=0$  的子空間的所有電子組態來作計算。

定義  $M = \sum_i S_i^Z \dots\dots\dots (2.2)$

周期性邊界條件(Periodic Boundary Condition)，有四組電子結構：

$|0, \#$ 、 $|\downarrow, \uparrow$ 、 $|\uparrow, \downarrow$ 、 $|\#, 0$ ，經過編碼後:

編號	狀態	$ n, n-1, \dots, 2, 1$
1	$ 0, \#$	
2	$ \uparrow, \downarrow$	
3	$ \downarrow, \uparrow$	
4	$ \#, 0$	



$$H|1\rangle = -2t\{|2\rangle + |3\rangle\} + U|1\rangle$$

$$H|2\rangle = -2t\{|1\rangle + |4\rangle\}$$

$$H|3\rangle = -2t\{|1\rangle + |4\rangle\}$$

$$H|4\rangle = -2t\{|2\rangle + |3\rangle\} + U|4\rangle$$

	$ 1\rangle$	$ 2\rangle$	$ 3\rangle$	$ 4\rangle$
$ 1\rangle$	U	-2t	-2t	0
$ 2\rangle$	-2t	0	0	-2t
$ 3\rangle$	-2t	0	0	-2t
$ 4\rangle$	0	-2t	-2t	U

所求出來的本徵值:

$$0, U, \frac{1}{2}(U - \sqrt{64t^2 + U^2}), \frac{1}{2}(U + \sqrt{64t^2 + U^2})$$

分別對應的本徵態:

$$(0 \quad -1 \quad 1 \quad 0)$$

$$(-1 \quad 0 \quad 0 \quad 1)$$

$$\left( 1 \quad \frac{U + \sqrt{64t^2 + U^2}}{8t} \quad \frac{U + \sqrt{64t^2 + U^2}}{8t} \quad 1 \right)$$

$$\left( 1 \quad \frac{U - \sqrt{64t^2 + U^2}}{8t} \quad \frac{U - \sqrt{64t^2 + U^2}}{8t} \quad 1 \right)$$

原則上我們可以利用編碼的方式紀錄每一個狀態，對於晶格數目為  $N$ ，半填滿狀態的 Hubbard 模型在  $M=0$  的子空間中，共有  $(C_{N/2}^N)^2 = D$  個狀態。依據漢米爾頓矩陣的定義寫下相應的  $D^2$  個矩陣元素，然後使用下一節所介紹的 Lanczos 方法，求出本徵值及本徵態。

## Lanczos Method

有了模型的漢米爾頓量之後，此時發現矩陣中的矩陣元素大都為零，是一個稀疏的矩陣(Sparse matrix)，在處理這種矩陣的對角化時，有一個很好的方法稱為 Lanczos Method，基本上它是以一一個初始態 $|\mathbf{f}_0\rangle$ ，然後用漢米爾頓量作用在此初始態 $|\mathbf{f}_0\rangle$ 上，試圖建構出一組完全正交的基底，並且以三對角化的計算方法來求出本徵態。

在一開始我們先給定一個初始態 $|\mathbf{f}_0\rangle$ ，要注意的是，這個初始態不能與基態正交，否則將無法求得正確的基態能量。對於不清楚基態情況時，我們可以利用亂數選取的方式而得初始態。如果我們已經知道系統的某些資訊，例如有很強的反鐵磁關聯，精確解的波函數，都可以當做初使態的參考。

將漢米爾頓量作用在 $|\mathbf{f}_0\rangle$ 上，想要求得一個與 $|\mathbf{f}_0\rangle$ 正交的向量 $|\mathbf{f}_1\rangle$

令  $|\mathbf{f}_1\rangle = H|\mathbf{f}_0\rangle - a_1|\mathbf{f}_0\rangle$ ，因為要求  $\langle\mathbf{f}_0|\mathbf{f}_1\rangle = 0$

$$\langle\mathbf{f}_0|\mathbf{f}_1\rangle = \langle\mathbf{f}_0|H|\mathbf{f}_0\rangle - a_1\langle\mathbf{f}_0|\mathbf{f}_0\rangle = 0, \text{ 所以 } a_1 = \frac{\langle\mathbf{f}_0|H|\mathbf{f}_0\rangle}{\langle\mathbf{f}_0|\mathbf{f}_0\rangle}$$

$$\langle\mathbf{f}_1|\mathbf{f}_1\rangle = \langle\mathbf{f}_1|H|\mathbf{f}_0\rangle = \langle\mathbf{f}_0|H|\mathbf{f}_1\rangle$$

次一個態 $|\mathbf{f}_2\rangle$ 同樣要與 $|\mathbf{f}_0\rangle$ 、 $|\mathbf{f}_1\rangle$ 正交

令  $|\mathbf{f}_2\rangle = H|\mathbf{f}_1\rangle - a_2|\mathbf{f}_1\rangle - b_1^2|\mathbf{f}_0\rangle$ ，因為要求  $\langle\mathbf{f}_0|\mathbf{f}_2\rangle = 0$ 、 $\langle\mathbf{f}_1|\mathbf{f}_2\rangle = 0$

$$\langle \mathbf{f}_1 | \mathbf{f}_2 \rangle = \langle \mathbf{f}_1 | H | \mathbf{f}_1 \rangle - a_2 \langle \mathbf{f}_1 | \mathbf{f}_1 \rangle = 0, \text{ 所以 } a_2 = \frac{\langle \mathbf{f}_1 | H | \mathbf{f}_1 \rangle}{\langle \mathbf{f}_1 | \mathbf{f}_1 \rangle}$$

$$\langle \mathbf{f}_0 | \mathbf{f}_2 \rangle = \langle \mathbf{f}_0 | H | \mathbf{f}_1 \rangle - b_1^2 \langle \mathbf{f}_0 | \mathbf{f}_0 \rangle = 0, \text{ 所以 } b_1^2 = \frac{\langle \mathbf{f}_0 | H | \mathbf{f}_1 \rangle}{\langle \mathbf{f}_0 | \mathbf{f}_0 \rangle} = \frac{\langle \mathbf{f}_1 | \mathbf{f}_1 \rangle}{\langle \mathbf{f}_0 | \mathbf{f}_0 \rangle}$$

因此我們建構出一般態

$$|\mathbf{f}_{n+1}\rangle = H|\mathbf{f}_n\rangle - a_n|\mathbf{f}_n\rangle - b_n^2|\mathbf{f}_{n-1}\rangle$$

$$\text{其中 } a_n = \frac{\langle \mathbf{f}_n | H | \mathbf{f}_n \rangle}{\langle \mathbf{f}_n | \mathbf{f}_n \rangle}, \quad b_n^2 = \frac{\langle \mathbf{f}_n | \mathbf{f}_n \rangle}{\langle \mathbf{f}_{n-1} | \mathbf{f}_{n-1} \rangle} \quad b_0 = 0$$

在此基底向量下，漢米爾頓矩陣可以寫成

$$H = \begin{bmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \Lambda \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \Lambda \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \Lambda \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & \Lambda \\ \text{M} & \text{M} & \text{M} & \text{M} & \end{bmatrix}$$

每一次遞迴產生三個參數，形成一個三對角矩陣，這種矩陣可以用 Numerical Recipes 一書<sup>22</sup>中的副程式 TQLI 來對角化，再用 SORT 來尋找最小的本徵值。藉由連續的遞迴我們可以得到越來越接近基態能量的本徵態，當第 n 次與 n+1 次遞迴的本徵值差小於  $10^{-9}$  時，遞迴停止。

## 2.2 變分蒙地卡羅法(Variational Monte Carlo,VMC)

Lanczos method 可以在小晶格時將漢米爾頓矩陣直接對角化，精確的得到低能態的本徵態和本徵能量，而本徵態可以表示為基底向量的線性疊加。如果我們最主要有興趣的是對系統基態(ground state)的研究，變分蒙地卡羅法不用直接對角化的方式將每一個電子組態的權重算出，好處是可以處理比較大的晶格。

變分蒙地卡羅法的做法如下:如果我們根據物理的直覺或解析上的分析架構了一個波函數，稱為嘗試波函數(trial wave function)，假設我們的嘗試波函數可以在基底向量上作線性展開如下：

$$|\mathbf{y}(I)\rangle = \sum_a f_a(I) |a\rangle$$

在漢米爾頓量的作用下得到嘗試能量(trial energy)，並且經由調變參數  $I$  (tuning parameter) 使得嘗試能量達到最低。

$$E(I) = \frac{\langle \mathbf{y}(I) | \hat{H} | \mathbf{y}(I) \rangle}{\langle \mathbf{y}(I) | \mathbf{y}(I) \rangle}$$
$$E(I) = \frac{\left( \sum_b \langle b | y_b(I) \right) \hat{H} \left( \sum_a y_a(I) |a\rangle \right)}{\sum_a \langle y_a(I) | y_a(I) \rangle}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\sum_{a,b} y_b^*(\mathbf{l}) y_a(\mathbf{l}) \langle \mathbf{b} | \hat{H} | \mathbf{a} \rangle}{\sum_a \langle y_a(\mathbf{l}) | y_a(\mathbf{l}) \rangle} \\
&= \frac{\sum_a y_a^2(\mathbf{a}) \left\{ \sum_b \frac{y_b^*(\mathbf{l})}{y_a^*(\mathbf{l})} \langle \mathbf{b} | \hat{H} | \mathbf{a} \rangle \right\}}{\sum_a \langle y_a(\mathbf{l}) | y_a(\mathbf{l}) \rangle} \\
&= \frac{\sum_a y_a^2 E(\mathbf{a})}{\sum_a y_a^2} = \sum_a P_r(\mathbf{a}) E(\mathbf{a}) \\
P_r(\mathbf{a}) &\equiv \frac{y_a^2}{\sum_a y_a^2}, \quad E(\mathbf{a}) \equiv \sum_b \frac{y_b^*(\mathbf{l})}{y_a^*(\mathbf{l})} \langle \mathbf{b} | \hat{H} | \mathbf{a} \rangle
\end{aligned}$$

當我們的電子組態由  $\mathbf{a}_0 \rightarrow \mathbf{a}_1$ ，令  $\mathbf{a}_1^*$  是期待產生的翻動後的狀態

$$\frac{y_{\mathbf{a}_1^*}^2}{y_{\mathbf{a}_0}^2} = \begin{cases} \geq 1 & \text{接受 : } \mathbf{a}_1 \rightarrow \mathbf{a}_1^* \\ & \left\{ \begin{array}{l} > R & \text{接受 : } \mathbf{a}_1 \rightarrow \mathbf{a}_1^* \\ < R & \text{拒絕 : } \mathbf{a}_1 \rightarrow \mathbf{a}_0 \end{array} \right. \end{cases}$$

當躍遷機率  $\geq 1$  時，我們就接受  $\mathbf{a}_1^*$  為新狀態。當躍遷機率  $< 1$  時，我們就用亂數產生器選取一個亂數  $R$ ，當躍遷機率  $> R$  就接受  $\mathbf{a}_1^*$  為新狀態，當躍遷機率  $< R$  仍然採取原狀態  $\mathbf{a}_0$ 。在  $|\mathbf{a}_1\rangle$  產生後，我們想要求得在這個  $|\mathbf{a}_1\rangle$  所對應的能量  $E(\mathbf{a}_1)$  如下：

$$E(\mathbf{a}_1) \equiv \sum_b \frac{y_b^*(\mathbf{I})}{y_a^*(\mathbf{I})} \langle \mathbf{b} | \hat{H} | \mathbf{a}_1 \rangle$$

每一個 $|\mathbf{a}\rangle$ 被漢米爾頓量作用後，會產生一組 $|\mathbf{b}\rangle$ ，對於所有產生的 $|\mathbf{b}\rangle$ 以上述公式求和，就是在 $|\mathbf{a}\rangle$ 所對應的能量。反覆使用此程序即可產生一系列的狀態： $|\mathbf{a}_0\rangle \rightarrow |\mathbf{a}_1\rangle \rightarrow |\mathbf{a}_2\rangle \dots |\mathbf{a}_M\rangle$ ，對所有的 $E(\mathbf{a}_i)$ 求取算術平均

$$E(\mathbf{I}) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M E(\mathbf{a}_i)$$

就可以得到我們能量的期望值。

當  $\left. \frac{dE(\mathbf{I})}{d\mathbf{I}} \right|_{\mathbf{I}^*} = 0$  時， $E(\mathbf{I}^*)$  為最小值如圖 2-1，即得到最佳的

(Optimized)嘗試波函  $|\mathbf{y}(\mathbf{I}^*)\rangle = \sum_a \mathbf{f}_a(\mathbf{I}^*) |\mathbf{a}\rangle$ 。

但事實上我們的嘗試波函數可能還沒有達到真實基態，這是變分蒙地卡羅法的限制，只能儘量靠近基態，而非求得精確的基態。

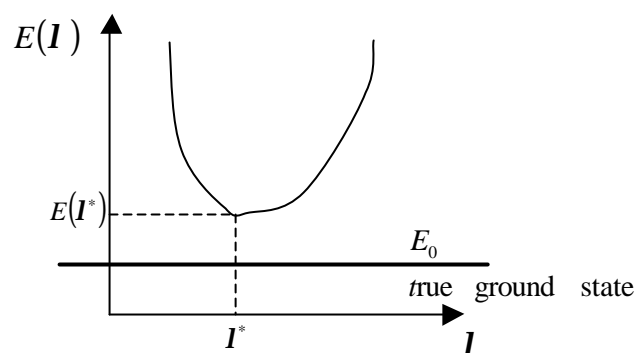


圖 2-1 嘗試波函數與真實基態關係圖

### 2.3 強關聯模型的嘗試波函數

當  $U=0$  時, Hubbard 模型的漢米爾頓量事實上是一個緊束縛(tight binding)模型 :

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle s} (c_{i,s}^+ c_{j,s} + h.c) \dots\dots\dots(2.3)$$

$c_{is}^+$  為電子產生算符, 表示在晶格點  $i$  處產生一自旋  $s$  的電子,  $c_{is}$  為電子湮滅算符, 表示在晶格點  $i$  湮滅一個自旋  $s$  的電子。  $h.c$  表示共軛 (hermitian conjugate):  $(c_{is}^+ c_{js})^+ = c_{js}^+ c_{is}$

我們將漢米爾頓量由真實空間(real space)到動量空間(momentum space), 即作傅立葉轉換 :

$$c_{is} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} c_{ks}$$

$$c_{is}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} c_{is}^+$$

$$H = \sum_k \mathbf{e}(k) \cdot c_{ks}^+ c_{ks} \dots\dots\dots(2.4)$$

在一維時, 之前已經作過  $\mathbf{e}(k) = -2t \cos k$

$c_{ks}^+ c_{ks} = n_{ks}$ , 漢米爾頓量在動量空間中的本徵態如下:

$$|y\rangle = \prod c_{k\uparrow}^+ \prod c_{k\downarrow}^+ |0\rangle$$

我們已經知道漢米爾頓量在動量空間中的形式，並且得到在動量空間中的本徵態(或是基態)，接下來的問題是：如何能夠將這個本徵態轉換為在真實空間中電子組態的線性組合？

為了說明方便，先以兩個粒子作說明。假設在動量空間中有兩個粒子動量分別為  $k$ 、 $q$ ，經過傅立葉轉換在真實空間中位置為  $r$ ， $R$  ( $r \neq R$ )。

$$\begin{aligned} |\mathbf{y}\rangle &= c_k^+ c_q^+ |0\rangle \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_r e^{ikr} c_r^+ \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_R e^{iqR} c_R^+ \right) |0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{r,R} e^{i(kr+qR)} c_r^+ c_R^+ |0\rangle \end{aligned}$$

我們對  $r$ 、 $R$  做加總時，令  $r = r_1$ 、 $R = r_2$  及  $r = r_2$ 、 $R = r_1$

$$\begin{aligned} e^{i(kr_1+qr_2)} c_{r_1}^+ c_{r_2}^+ |0\rangle \\ e^{i(kr_2+qr_1)} c_{r_2}^+ c_{r_1}^+ |0\rangle = -e^{i(kr_2+qr_1)} c_{r_1}^+ c_{r_2}^+ |0\rangle \end{aligned}$$

上述兩種狀況可以合併寫成一個行列式，稱為 Slater 行列式，所以在真實空間中波函數

$$|\mathbf{y}\rangle = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} e^{ikr_1} & e^{ikr_2} \\ e^{iqr_1} & e^{iqr_2} \end{vmatrix} c_{r_1}^+ c_{r_2}^+ |0\rangle$$



當系統有  $N$  個電子時，其真實空間中的波函數

$$|y\rangle = \sum \det(e^{ik_i^\uparrow r_j^\uparrow}) \det(e^{ik_i^\downarrow r_j^\downarrow}) \prod_{j=1}^{N\uparrow} c_{r_j^\uparrow, \uparrow}^+ \prod_{j=1}^{N\downarrow} c_{r_j^\downarrow, \downarrow}^+ |0\rangle$$

當本徵態  $|\{n_{k,s}\}\rangle$  是將不同動量的費米子由最低能量開始向上填，一直到費米面，此時稱為 Fermi sea 波函數。

$$|FS\rangle = \prod_{k_\uparrow \leq k_F} c_{k_\uparrow}^+ \prod_{k_\downarrow \leq k_F} c_{k_\downarrow}^+ |0\rangle$$

$$k : -k_F, -k_F + \Delta, \dots, 0, 1, 2, \dots, k_F$$

$$k_F = \frac{N-1}{2} \Delta$$

$$\Delta = \frac{2p}{L}$$

若系統有  $N$  個費米子，佔據動量空間的  $-k_F, -k_F + \Delta, \dots, 0, 1, 2, \dots, k_F$ ，

則真實空間中的 Fermi sea 波函數可以寫成下列方程式：

$$|FS\rangle = \sum \det(e^{ik_i^\uparrow r_j^\uparrow}) \det(e^{ik_i^\downarrow r_j^\downarrow}) \prod_{j=1}^{N\uparrow} c_{r_j^\uparrow, \uparrow}^+ \prod_{j=1}^{N\downarrow} c_{r_j^\downarrow, \downarrow}^+ |0\rangle$$

$$= \begin{vmatrix} e^{-ik_F^\uparrow r_1} & e^{-ik_F^\uparrow r_2} & \dots & e^{-ik_F^\uparrow r_N} \\ e^{i(-k_F^\uparrow + \Delta)r_1} & e^{i(-k_F^\uparrow + \Delta)r_2} & \mathbf{M} & e^{i(-k_F^\uparrow + \Delta)r_N} \\ \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{M} \\ e^{ik_F^\uparrow r_1} & e^{ik_F^\uparrow r_2} & \Lambda & e^{ik_F^\uparrow r_N} \end{vmatrix} \times$$

$$\begin{vmatrix} e^{-ik_F^\downarrow r_1} & e^{-ik_F^\downarrow r_2} & \dots & e^{-ik_F^\downarrow r_N} \\ e^{i(-k_F^\downarrow + \Delta)r_1} & e^{i(-k_F^\downarrow + \Delta)r_1} & \mathbf{M} & e^{i(-k_F^\downarrow + \Delta)r_N} \\ \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{M} \\ e^{ik_F^\downarrow r_1} & e^{ik_F^\downarrow r_2} & \Lambda & e^{ik_F^\downarrow r_N} \end{vmatrix} \times \prod_{j=1}^{N\uparrow} c_{r_j^\uparrow, \uparrow}^+ \prod_{j=1}^{N\downarrow} c_{r_j^\downarrow, \downarrow}^+ |0\rangle$$

因此，一個緊束縛模型在真實空間的本徵態，可以根據在動量空間中自旋向上電子所佔據的  $k_i^\uparrow$ ，自旋向下電子所佔據的  $k_i^\downarrow$ ，而分別用兩個 Slater 行列式得到他們在真實空間中  $r_j^\uparrow$ ， $r_j^\downarrow$  的權重。

在一維的基態，動量空間是緊致排列，波函數可以再化為更簡單的形式。首先，我們來看不考慮自旋(spinless)的 Slater 行列式：

$$\det(e^{ik_i r_j}) = \begin{vmatrix} e^{-ik_F r_1} & e^{-ik_F r_2} & \dots & e^{-ik_F r_N} \\ e^{i(-k_F + \Delta)r_1} & e^{i(-k_F + \Delta)r_1} & \text{M} & e^{i(-k_F + \Delta)r_N} \\ \text{M} & \text{M} & \text{M} & \text{M} \\ e^{ik_F r_1} & e^{ik_F r_2} & \Lambda & e^{ik_F r_N} \end{vmatrix}$$

$$= e^{-ik_F \sum_{i=1}^N r_i} \begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ e^{i\Delta r_1} & e^{i\Delta r_1} & \text{M} & e^{i\Delta r_N} \\ \text{M} & \text{M} & \text{M} & \text{M} \\ e^{i2k_F r_1} & e^{i2k_F r_2} & \Lambda & e^{i2k_F r_N} \end{vmatrix}$$

$$\text{令 } X_i = e^{i\Delta r_i}, \text{ 原行列式} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \Lambda & 1 \\ X_1 & \text{M} & \text{M} & \text{M} & \text{M} \\ X_1^2 & \text{M} & \text{M} & \text{M} & \text{M} \\ \text{M} & \text{M} & \text{M} & \text{M} & \text{M} \\ X_1^{N-1} & X_2^{N-1} & X_3^{N-1} & \Lambda & X_N^{N-1} \end{vmatrix}$$

此類型行列式稱為 Vandermonde 行列式，其行列式可表示為

$$\prod_{i < j} (x_i - x_j) = \prod_{i < j} (e^{i\Delta r_i - i\Delta r_j}) = \prod_{i < j} e^{i\frac{\Delta}{2}(r_i + r_j)} \left[ e^{i\frac{\Delta}{2}(r_i - r_j)} - e^{-i\frac{\Delta}{2}(r_i - r_j)} \right]$$

$$\text{即 } \det(e^{ik_i r_j}) = e^{-ik_F \sum_{i=1}^N r_i} \prod_{i < j} \left[ e^{i\frac{\Delta}{2}(r_i + r_j)} \right] \frac{1}{2i} \sin \frac{\Delta}{2} (r_i - r_j)$$

$$= e^{-ik_F \sum_{i=1}^N r_i} \left[ e^{ik_F \sum_{i=1}^N r_i} \right] \prod_{i<j} \frac{1}{2i} \sin \frac{\Delta}{2} (r_i - r_j)$$

$$= \left( \frac{1}{2i} \right)^{\frac{N(N-1)}{2}} \prod_{i<j} \sin \frac{\Delta}{2} (r_i - r_j)$$

代回整個 Fermi sea 波函數

$$|FS\rangle = \left( \frac{1}{2i} \right)^{\frac{N(N-1)}{2}} \sum \prod_{i<j}^{\uparrow} \sin \frac{\Delta}{2} (r_i^{\uparrow} - r_j^{\uparrow}) \prod_{i<j}^{\downarrow} \sin \frac{\Delta}{2} (r_i^{\downarrow} - r_j^{\downarrow})$$

$$\times \prod_{i=1}^{N\uparrow} c_{r_i^{\uparrow}, \uparrow}^{\uparrow} \prod_{i=1}^{N\downarrow} c_{r_i^{\downarrow}, \downarrow}^{\downarrow} |0\rangle \dots \dots \dots (2.5)$$

一維真實空間的波函數在此以更簡單的形式表現，原本的 Slater 行列式被化簡為 sin 函數的乘積，可以使數值的計算過程達到更簡化的目的。

由以上討論我們知，基態時動量空間的波函數是緊緻排列，因為對稱的關係，總動量為零，所以在真實空間波的函數應具有平移對稱性。若電子組態 $|a_0\rangle$ 的平移為 $|a_1\rangle$ 、 $|a_2\rangle$ ...  $|a_N\rangle$ ，例如： $|a_1\rangle=|1,3,6,8\rangle$ 、 $|a_2\rangle=|2,4,7,9\rangle$ 、 $|a_3\rangle=|3,5,8,10\rangle$ ...，則在基態下 $|a_0\rangle$ 、 $|a_1\rangle$ 、 $|a_2\rangle$ ..整組向量的權重相同;非基態時若總動量為 Q，則  $|a_N\rangle = e^{iQ*(N-1)} |a_1\rangle$ 。

## Gutzwiller 波函數

對於 Hubbard 模型我們可採用 Gutzwiller 波函數

$$\begin{aligned}
 |GW\rangle &= g^{N_D} |FG\rangle \\
 &= \sum_{\{c\}} g^{N_D} \det(e^{ik_i^\uparrow r_j^\uparrow}) \det(e^{ik_i^\downarrow r_j^\downarrow}) \prod_{j=1}^{N^\uparrow} c_{r_j^\uparrow, \uparrow}^+ \prod_{j=1}^{N^\downarrow} c_{r_j^\downarrow, \downarrow}^+ |0\rangle \dots\dots\dots (2.6)
 \end{aligned}$$

$N_D$  表示雙佔據的晶格的數目，det 為之前定義過的 Slater 行列式

U=0 時， $g=1$  此時波函數等於理想費米電子氣的波函數；U 增加時， $g<1$  會將一些雙佔據的情況排斥掉； $U \rightarrow \infty$  時， $g=0$  會將所有的有雙佔據的組態全部排除，在研究 t-J 模型時，排除雙佔據的限制即可以  $g=0$  來實現。

## HM 波函數

1991 年, Hellberg 和 Mele 以變分蒙地卡羅法研究一維 t-J 模型, 提出了一個波函數<sup>23</sup>:

$$\begin{aligned}
 |HM\rangle &= P_D \sum_{\{c\}} |SF|^n \det(e^{ik_i^\uparrow r_j^\uparrow}) \det(e^{ik_i^\downarrow r_j^\downarrow}) \prod_{j=1}^{N^\uparrow} c_{r_j^\uparrow, \uparrow}^+ \prod_{j=1}^{N^\downarrow} c_{r_j^\downarrow, \downarrow}^+ |0\rangle \\
 &= P_D \sum_{\{c\}} \prod_{i>j} \left[ \frac{L}{p} \sin\left(\frac{p}{L}(r_i - r_j)\right) \right]^n \det(e^{ik_i^\uparrow r_j^\uparrow}) \det(e^{ik_i^\downarrow r_j^\downarrow}) \prod_{j=1}^{N^\uparrow} c_{r_j^\uparrow, \uparrow}^+ \prod_{j=1}^{N^\downarrow} c_{r_j^\downarrow, \downarrow}^+ |0\rangle \\
 &\dots\dots\dots(2.7)
 \end{aligned}$$

其中  $P_D$  是一個投影算符，它將所有雙佔據的狀態排除掉，以滿足 t-J 模型的限制，其作用與  $|GW\rangle$  中  $g=0$  的意義是相同的。

$\prod_{i>j} |SF|^n$  稱為 Jastrow factor :

$$\prod_{i>j} |SF|^n = \prod_{i>j} \frac{L}{p} \sin\left(\frac{p}{L}(r_i - r_j)\right)^n$$

在此  $r_i$  為不考慮自旋 (spinless) 的費米子的位置， $|SF|$  為不考慮自旋 (spinless) 的 Slater 行列式。當電子彼此間越分離時則  $|SF|$  值越大，反之，電子彼此間越緊密則  $|SF|$  值越小。

若  $n > 0$ ，相當於在電子之間加入排斥的關聯性，權重較大的電子組態是電子比較疏離的分佈。當  $n = 0$ ，時 HM 波函數就等於 Gutzwiller 波函數。若  $n < 0$ ，相當於在電子之間加入吸引的關聯性，權重較大的電子是電子聚在一起的分佈。當  $n < -0.5$  時平均的交互作用是吸引的，系統產生相分離 (Phase separation) 即電荷密度分佈不均勻。以 HM 波函數來研究 t-J 模型的基態性質是一個成功的數值研究，我們會在第三章再作詳細討論。

## 第3章 Hubbard 與 t-J 模型的數值結果

為了驗證我們對所使用數值方法的認識的正確性，並且加深掌握這些方法的熟悉度，本章中重複研究已經被充份了解的 Hubbard 模型、t-J 模型，透過這些數值的結果來了解一維 Hubbard 模型與 t-J 模型的物理性質，並且跟一維解析計算的結果及標準理論比較，希望由此出發來做更深入的研究。在本章中我們將使用精確對角化以及變分蒙地卡羅法來研究下列一維模型中重要的物理量，包括：能量、基態的自旋結構因子(spin structure factor)、電荷結構因子(charge structure factor)、單電子動量分佈(single particle momentum distribution)，並且回顧變分蒙地卡羅法中的 HM 波函數、SP 波函數研究的數值結果。

### 3.1 Hubbard 模型

一維 Hubbard 模型的漢米爾頓量如下

$$H = -t \sum_{\langle i, i+1 \rangle s}^{Na} (c_{is}^+ c_{i+1, s} + h.c.) + U \sum_i^{Na} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

首先我們以精確對角化的方法對 12 個晶格點的一維 Hubbard 模型做計算，可以得到基態能量與低激發態能量等重要的訊息。我們在表

3.1 中列出 Hubbard 模型的基態能量，分別對不同的電子密度與不同的  $U$  做計算  $D$  為展開希爾伯特空間(Hilbert space)的所需的基底向量數目，當有  $N_a=12$  個晶格， $N_e$  個電子時，所須的狀態數  $D = (C_{N_e}^{N_a})^2$ 。

表 3.1 Hubbard 模型基態能量  $N_a=12$

電子密度	D	U=0	U=4	U=8	U=12	U=16	U=20
2/12	144	-4	-3.89901	-3.88351	-3.87744	-3.87421	-3.87221
4/12	4356	-7.72741	-7.09934	-6.93376	-6.86259	-6.82353	-6.79895
6/12	48400	-10.9282	-9.21563	-8.63723	-8.37394	-8.22693	-8.13381
8/12	245025	-13.3843	-9.99187	-8.70248	-8.11035	-7.78193	-7.57532
10/12	627264	-14.9282	-9.25348	-7.03928	-6.06562	-5.54006	-5.2146
12/12	853776	-15.4548	-6.95645	-3.96286	-2.72343	-2.06568	-1.66136

表 3.1 中的數據我們將之繪成圖形陳列在圖 3-1 中，在高電子密度時，系統無可避免的會產生雙佔據的情形，在  $U$  越大時，高電子密度區的能量就越高，在大  $U$  的情況下，最低能量在四分之一填滿 (quarter-filling)，在此時系統具有夠充份可以自由跳躍的電子，並且又可以避免大量的雙佔據情形。當  $U=0$  時，系統最低能量在半填滿，此時系統擁有最多可以跳躍的電子。

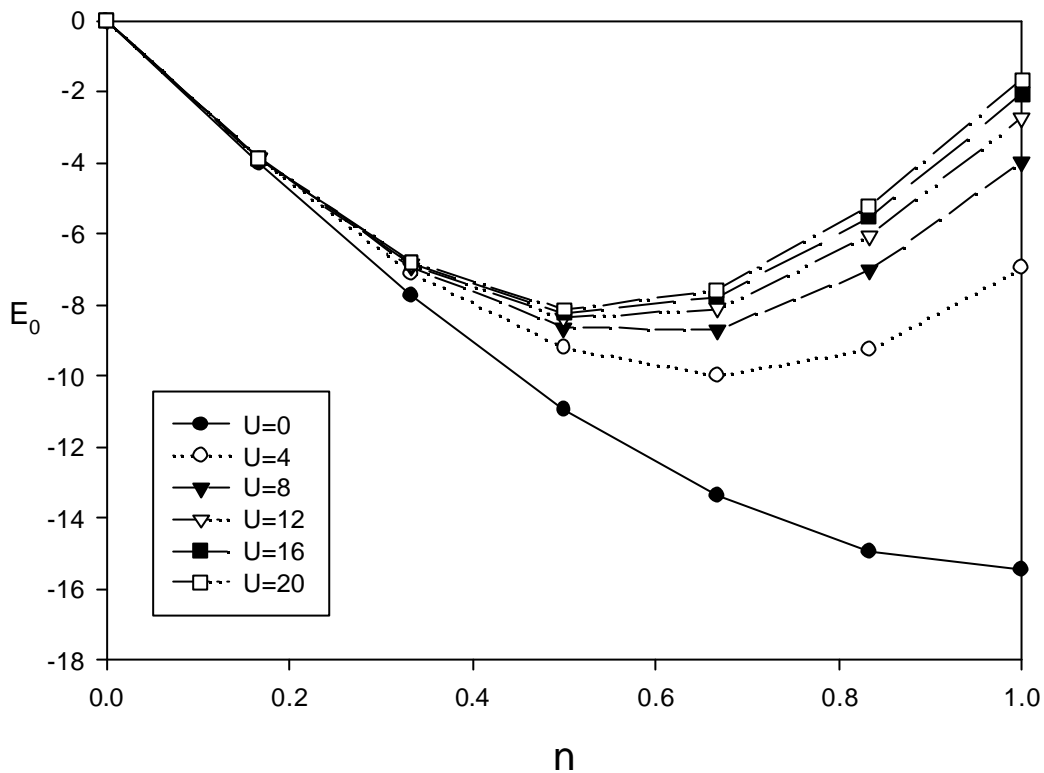


圖 3-1 Hubbard 模型  $N_a=12$  基態能量

誠如我們在第一章所題過的，一維的 Hubbard 模型無論是從精確解或是由弱耦合重整化群的理論，都預測此模型可以用 Tomonaga-Luttinger 液體理論(TLL theory)來描述，為了驗證這樣一個理論上的結果，我們在數值上必須計算基態的一些關聯函數來加以驗證。

對於 Hubbard 模型我們計算了單電子動量分佈，自旋與電荷結構因子，它們的定義與結果如下：



## 單電子動量分佈(single particle momentum distribution)

$$\begin{aligned}
 n_{k\uparrow} &= c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} & (\Theta c_{k\uparrow} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{ikr} c_{r\uparrow}; c_{k\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{-ikr} c_{r\downarrow}^+) \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{r,r'} e^{ik(r-r')} c_{r'\uparrow}^+ c_{r\uparrow} & (r-r' \equiv R, r' = r+R) \\
 &= \frac{1}{N} \sum_r \sum_R e^{-ikR} c_{r+R\uparrow}^+ c_{r\uparrow}
 \end{aligned}$$

所以當我們的用 Lanczos 方法求得基態之後，代入下式

$\sum_{r=0}^{Na} \langle \mathbf{y}_0 | c_{r+R\uparrow}^+ c_{r\uparrow} | \mathbf{y}_0 \rangle$ ，再做傅立葉轉換，即為單電子的動量分佈函數。

$$\begin{aligned}
 \langle n_{k\uparrow} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_r \sum_R e^{-ikR} \langle \mathbf{y}_0 | c_{r+R\uparrow}^+ c_{r\uparrow} | \mathbf{y}_0 \rangle \\
 &= \sum_R e^{-ikR} \langle \mathbf{y}_0 | c_{r+R\uparrow}^+ c_{r\uparrow} | \mathbf{y}_0 \rangle
 \end{aligned}$$

圖 3-2 為 Hubbard 模型的單電子動量分佈。當  $U=0$  時，電子在動量空間中，由最低態依次排到費米面  $k_F$ ，當動量大於  $k_F$  時，就沒有粒子存在，對於 Hubbard 模型允許雙佔據  $k_F = \frac{Ne^{\uparrow or \downarrow} - 1}{2} \Delta$ ， $\Delta = \frac{2p}{L}$ 。當  $Ne^{\uparrow} = Ne^{\downarrow} = 3$ ， $k_F = \frac{p}{6}$ ； $Ne^{\uparrow} = Ne^{\downarrow} = 5$ ， $k_F = \frac{2p}{6}$ 。

當  $U$  增加時，單電子動量分佈在  $k_F$  的不連續跳躍變緩，此結果與 TLL 理論所預測的，在  $k_F$  呈 power law 的行為是一致的。

$$n(k) = n(k_F) - C |k - k_F|^a \operatorname{sgn}(k - k_F) \quad a = \frac{(k_r - 1)^2}{4K_r}$$

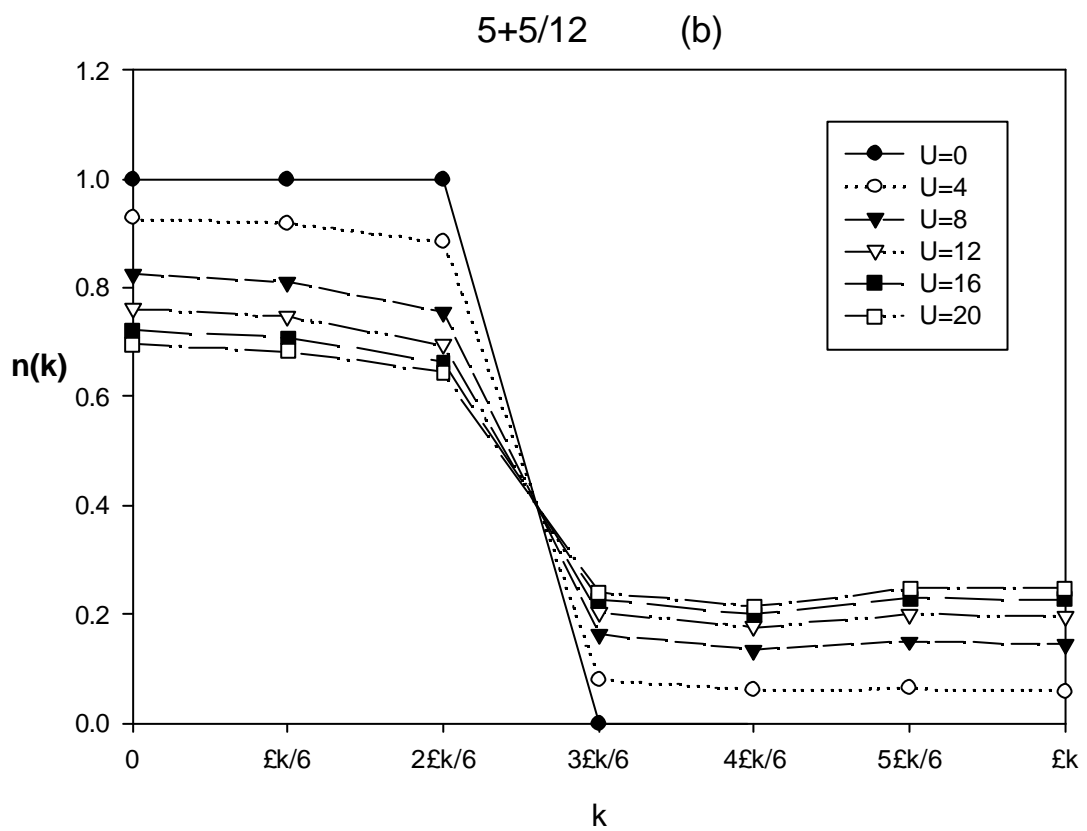
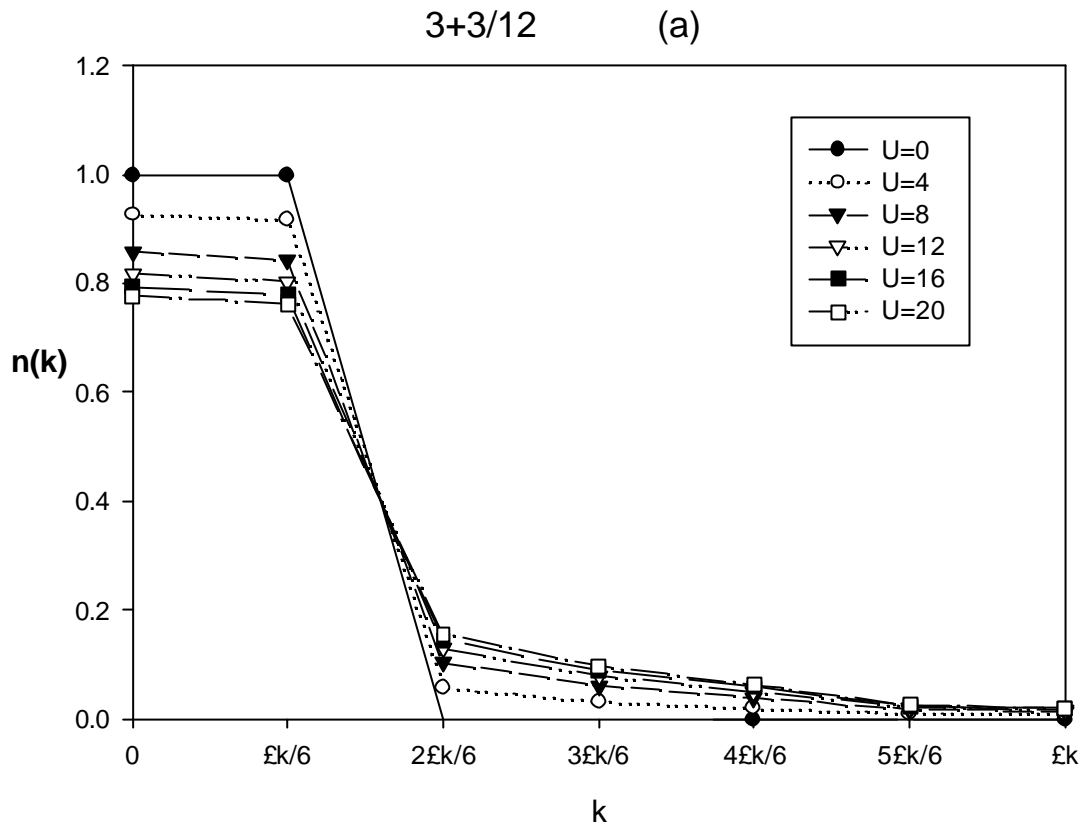


圖 3-2 Hubbard 模型的單電子動量分佈

## 自旋結構因子(spin structure factor)

在之前我們定義過自旋關聯函數如式(1.5)，其表示在真實空間中自旋的關聯性，自旋關聯函數作傅立葉轉換到動量空間稱為自旋結構因子(spin structure factor)，實驗上可以用中子散射的方法來測量材料中的自旋結構因子<sup>24</sup>。自旋結構因子的定義為

$$S(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r S(r) e^{ikr}$$

圖 3-4 為 Hubbard 模型在不同的電子密度下，隨著不同的  $U$  變化的自旋結構因子。 $U=0$  時，在  $k > 2k_F$  之後會產生平台。因為電子由費米面的一端到另一端的動量差為  $2k_F = \frac{2p}{6} - (-\frac{p}{6}) = \frac{3p}{6}$ ，圖 3-3 為  $Na=12$ 、 $Ne=6$ ， $2k_F$  的示意圖：

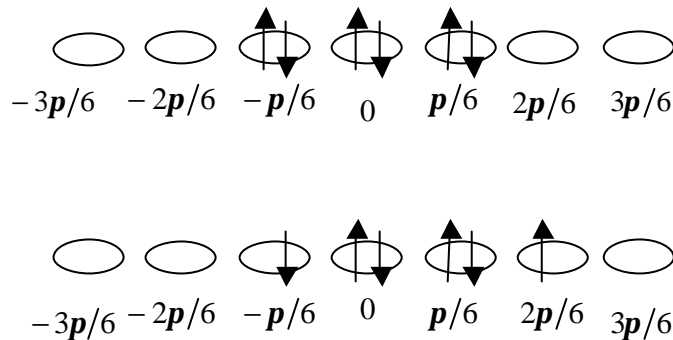


圖 3-3  $3+3/12$   $2k_F$  示意圖

當  $U \neq 0$  時，自旋關聯主導(spin dominant)，在  $2k_F$  處會產生峰值，隨著  $U$  逐漸增大峰值就越大，這與之前 TLL 理論所描述的，在  $K_F < 1$  時，自旋關聯主導是一致的。

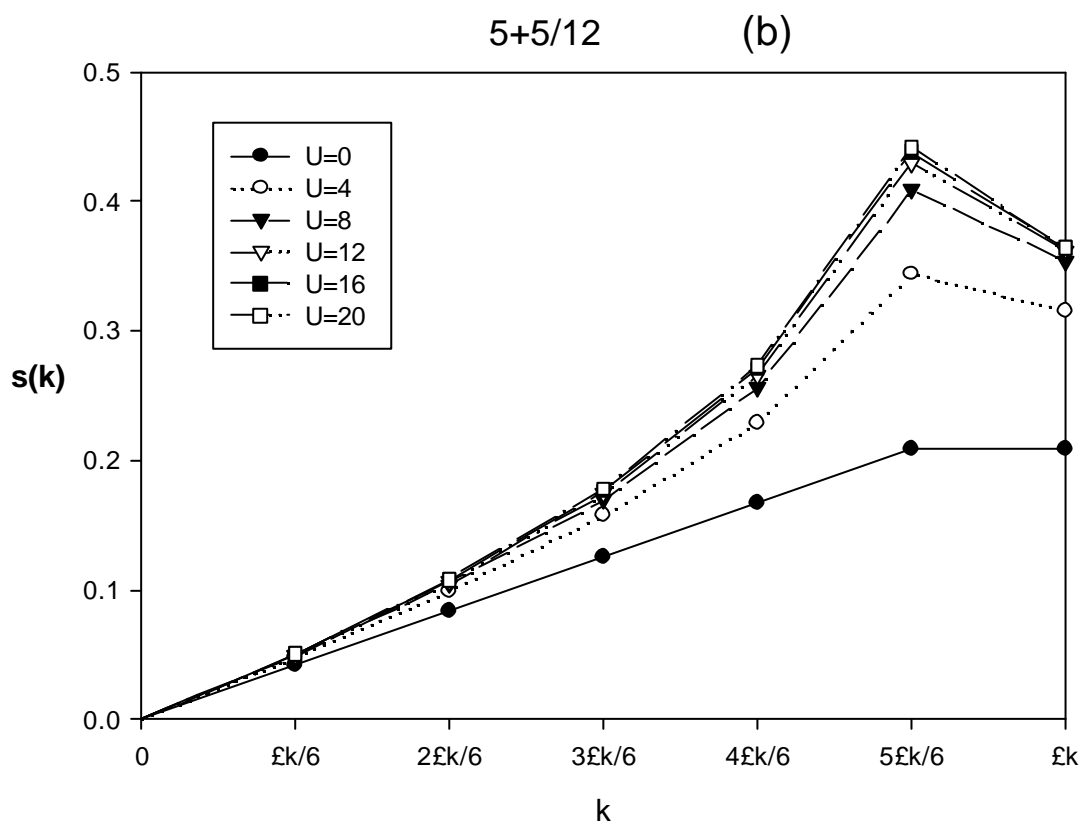
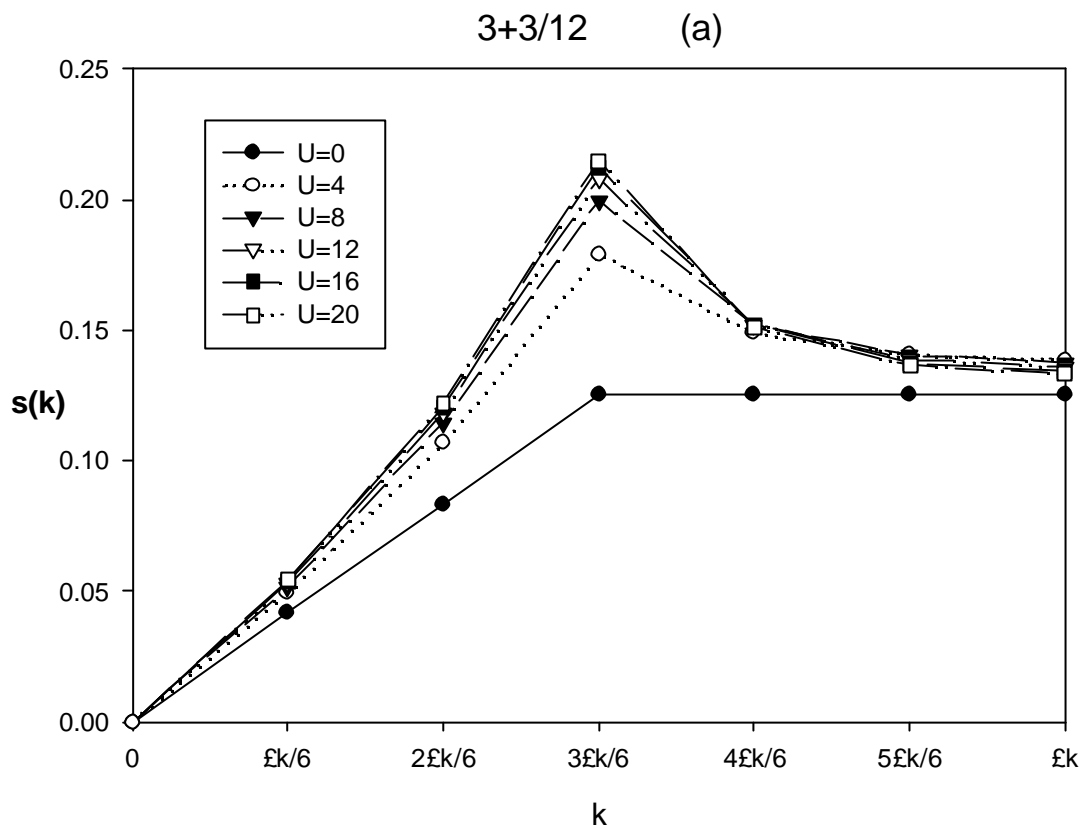


圖 3-4 Hubbard 模型的自旋結構因子

## 電荷結構因子(Charge Structure factor)

首先定義在真實空間中電荷密度關聯函數(Density correlation function)。

$$D(r) = \langle \mathbf{y} | \frac{1}{N} \sum_i n_i n_{i+r} | \mathbf{y} \rangle$$

$D(r)$  表示在真實空間中電荷密度的關聯性。我們作傅立葉轉換後，得到電荷在動量空間中的結構因子。

$$D(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r D(r) e^{ikr}$$

圖 3-5 為 Hubbard 模型的電荷結構因子，當  $U=0$  時，如同自旋結構因子，在  $k > 2k_F$  之後會產生平台，隨著  $U$  增大，因為  $U$  使得電子不喜歡雙佔據，成為 spinless 的費米子，在動量空間一個動量只允許一個費米子佔據，平台會移到  $4k_F$  處。

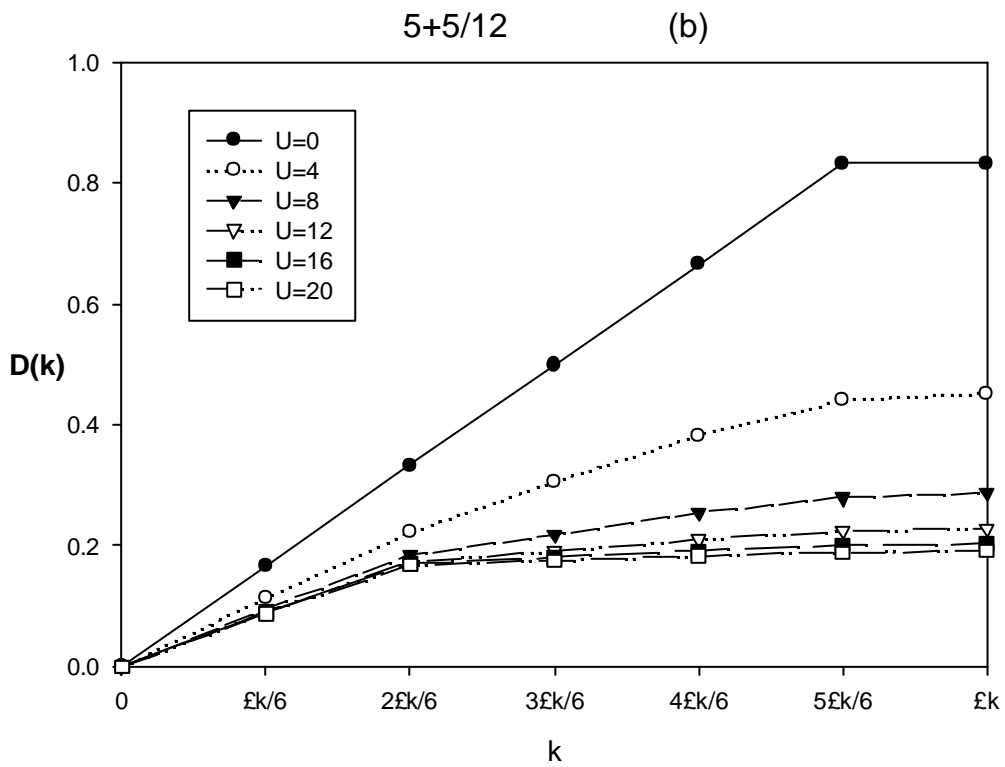
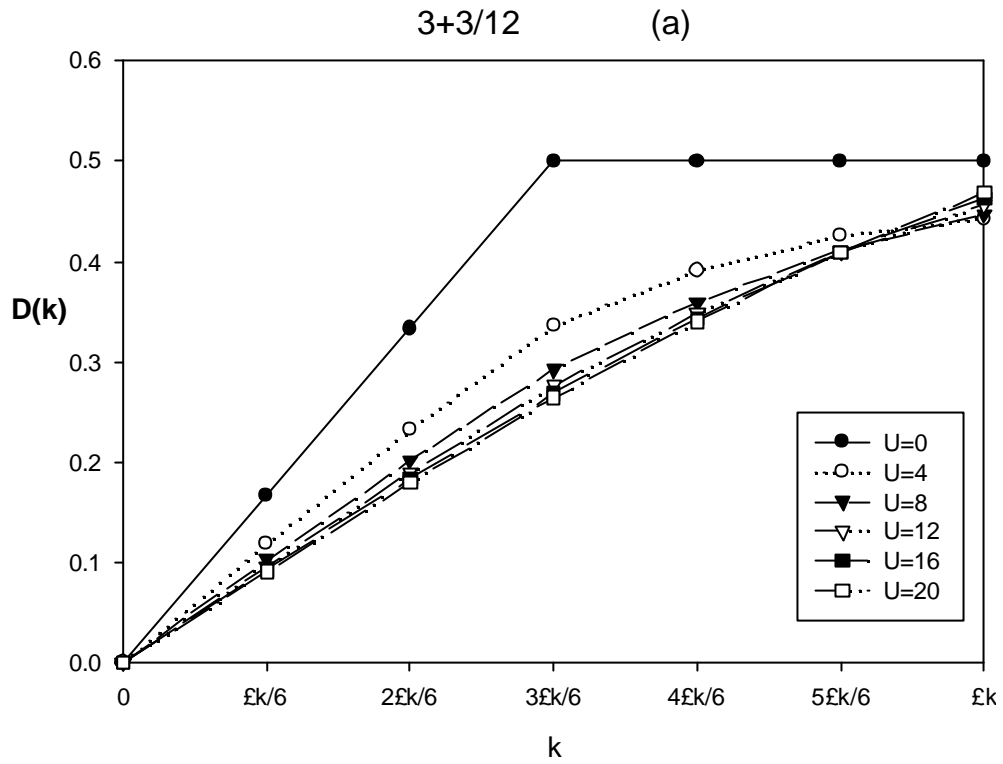
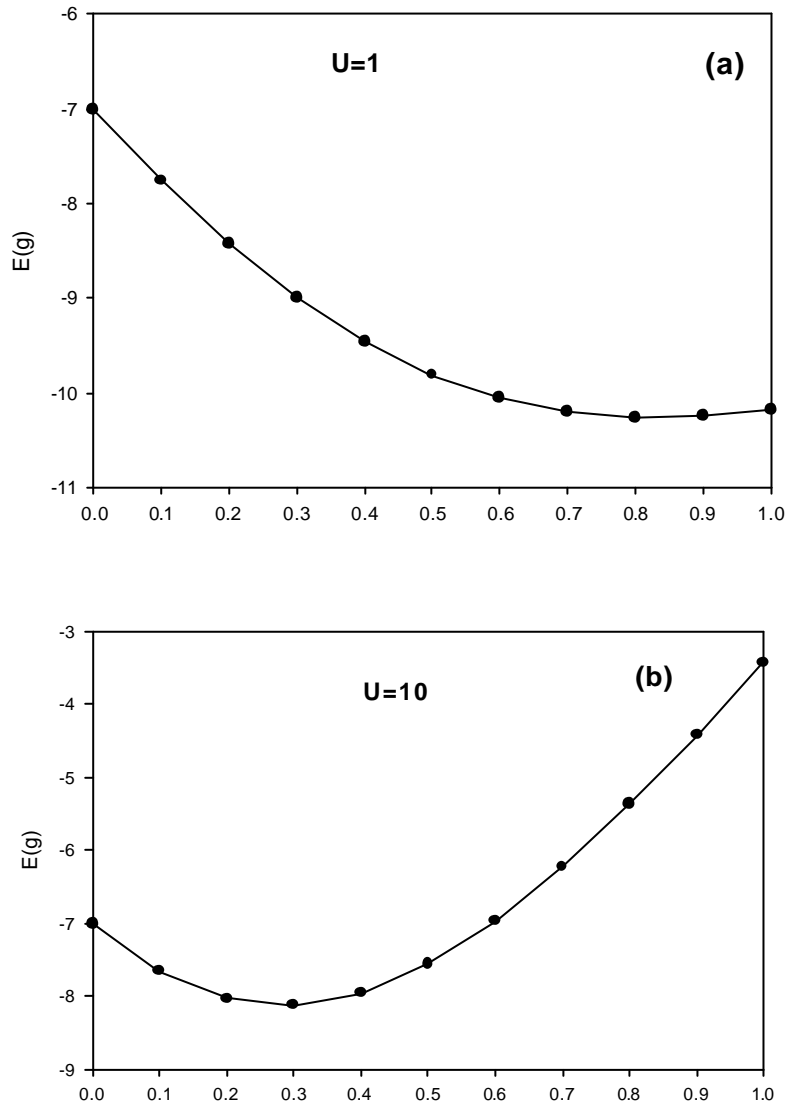


圖 3-5 Hubbard 模型的電荷結構因子

## Gutzwiller 波函數的結果

我們已經由經確對角化得到一些 Hubbard 模型數值的結果，現在我們使用 2.3 節提到的 Gutzwiller 波函數來做變分的研究，以  $N_a = 12$ 、 $N_e^\uparrow = 3$ 、 $N_e^\downarrow = 3$  為例，對應於不同調變參數  $g$  的嘗試波函數會有不同的嘗試能量  $E(g)$ ，如圖 3-6。



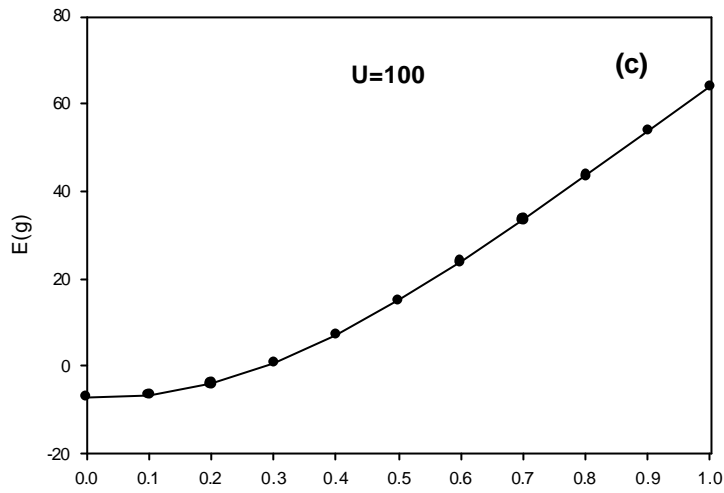


圖 3-6 (a) U=1 (b) U=10 (c) U=100 嘗試能量對調變參數 g 作圖

圖 3-7、3-8 分別為不同 U 時對應最佳調變參數  $g^*$ (Optima tuning parameter)、最佳嘗試能量。

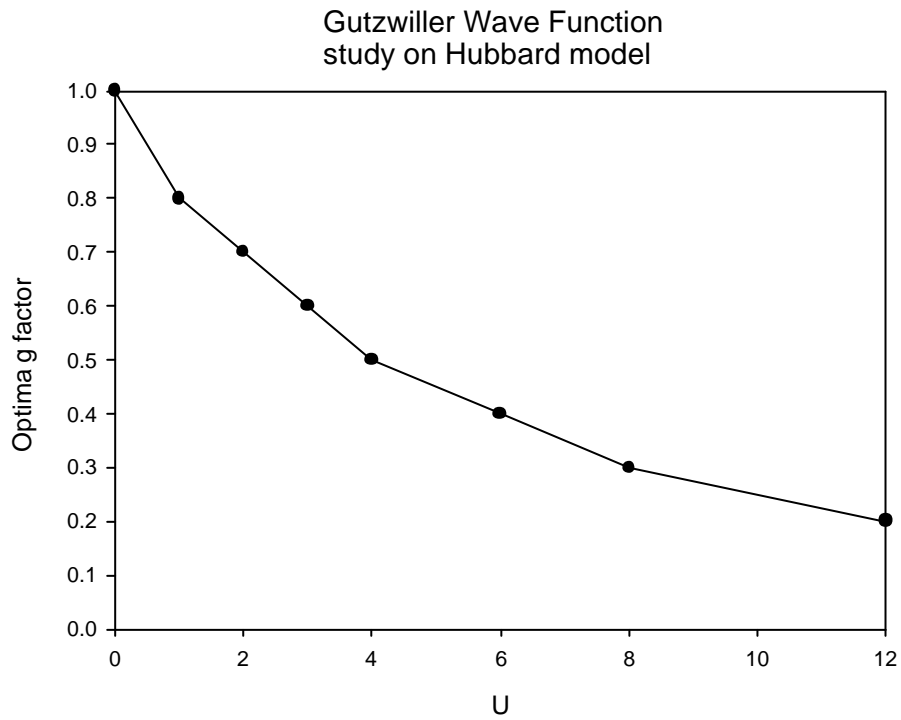


圖 3-7 U 對最佳調變參數  $g^*$  作圖



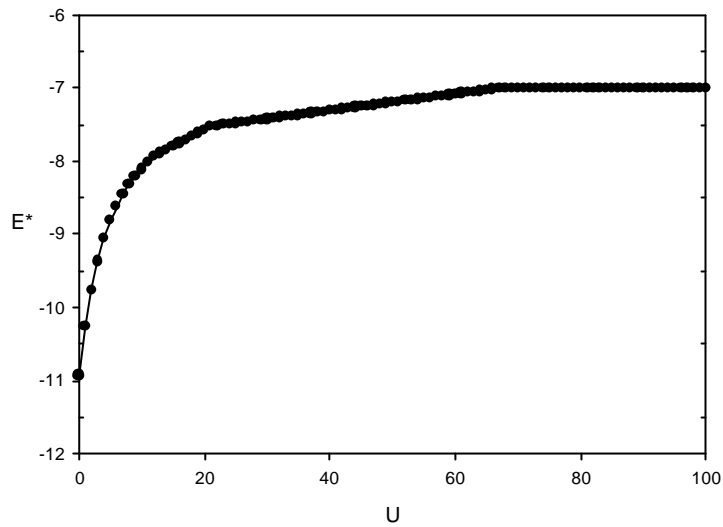


圖 3-8 U對最佳嘗試能量  $E^*$ 作圖

將表 3.2 中 Gutzwiller 波函數的結果與精確對角化的基態能量比較，最佳嘗試能量如預期的比精確對角化的結果高出一些。

表 3.2 Na=12 Ne=6 的最佳嘗試能量與基態能量

U	0	4	8	12	16	20
最佳嘗試能量	-10.9282	-9.05918	-8.31425	-7.9377	-7.75946	-7.58122
基態能量	-10.9282	-9.21563	-8.63723	-8.37394	-8.22693	-8.13381

### 強關聯極限

在  $U/t \rightarrow \infty$  極限下 Hubbard 模型將所有雙佔據的狀態全部排除，等同於  $J \rightarrow 0$  極限下的 t-J 模型，因為一階的微擾理論指出，此兩個模型在  $J=0$ ， $\frac{U}{t} = \infty$  時，有相同的基態波函數。這兩個模型有一個關係式： $J \cong \frac{4t^2}{U}$ ，我們由精確對角化的方法來檢驗在有限晶格下，兩模型的關係。如圖 3-9，Hubbard 模型和 t-J 模型，在小 J 的情況下能量

幾乎重疊，但在  $J/t > 0.3$  之後，此兩個模型的能量已經有明顯的差別，這說明在  $J/t > 0.3$  之後， $t$ - $J$  模型的物理性質可能開始與 Hubbard 模型偏離。事實上當  $J \gg t$  之後， $t$ - $J$  模型有所謂的相分離基態出現，即所有的電子為了要獲得較多的自旋能量而聚集在一起，這是在 Hubbard 模型中不會出現的，關於  $t$ - $J$  模型的性質我們會在下一節詳細說明。

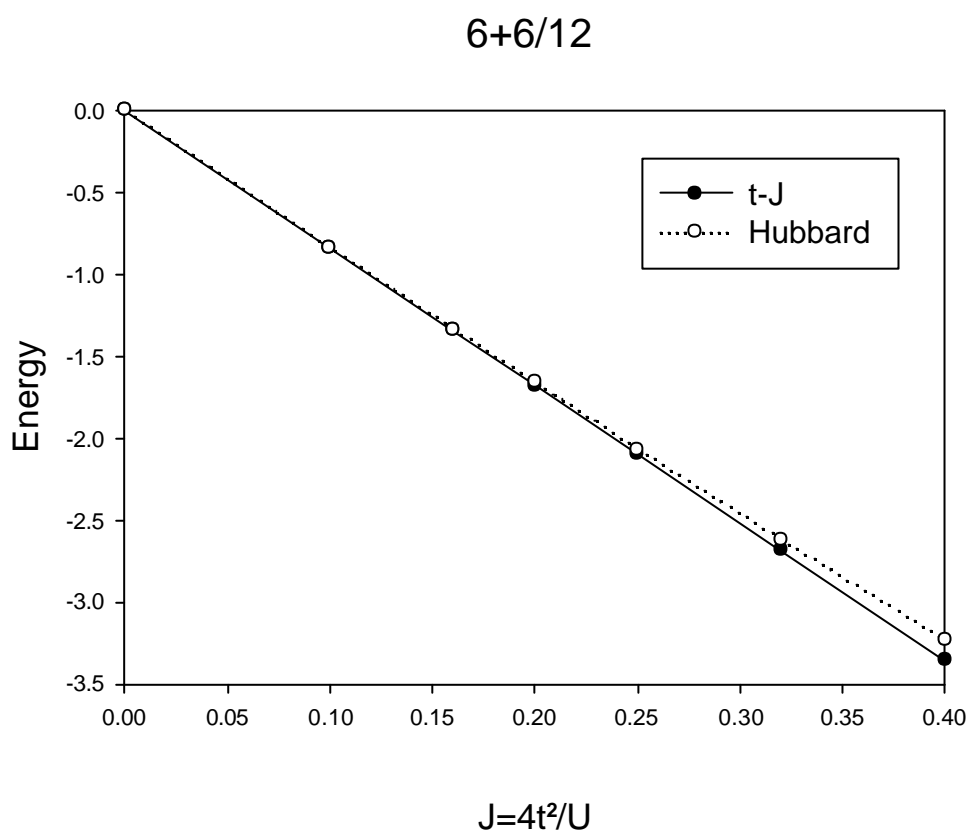


圖 3-9 哈柏模型和  $t$ - $J$  模型的能量比較圖

### 3.2 t-J 模型

一維 t-J 模型的漢米爾頓量:

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i, i+1 \rangle s} (c_{is}^+ c_{i+1, s} + h.c) + J \sum_{\langle i, i+1 \rangle} (\hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1} - \frac{1}{4} n_i \cdot n_{i+1})$$

1991 年 M. Ogata 的研究群用精確對角化的方法詳細的研究了晶格點為 16 的一維 t-J 模型<sup>10</sup>，本文中重複了部分結果。

#### 能量

表 3.3 是在不同的電子密度及自旋作用 J 下的基態能量。

表 3.3 1D t-J 模型 Na=16 能量

電子密度	D	J=0.5	J=1.0	J=1.5	J=2.0	J=2.5	J=3.0	J=3.5	J=4.0
2 / 16	240	-3.92912	-3.93888	-3.95728	-4	-4.11232	-4.33648	-4.64352	-5.00016
4 / 16	10920	-7.3288	-7.44224	-7.60704	-7.84736	-8.19616	-8.69152	-9.38624	-10.29904
6 / 16	160160	-9.8136	-10.24144	-10.76704	-11.40192	-12.15904	-13.05984	-14.19264	-15.74992
8 / 16	900900	-11.14784	-12.16608	-13.30064	-14.54752	-15.90784	-17.39248	-19.06304	-21.26048
10 / 16	2018016	-11.2424	-13.1336	-15.12432	-17.20432	-19.37072	-21.6296	-24.0136	-26.80928
12 / 16	1681680	-10.16288	-13.16192	-16.22448	-19.34032	-22.50624	-25.7248	-29.01152	-32.4672
14 / 16	411840	-8.13904	-12.396	-16.68128	-20.98784	-25.31232	-29.65376	-34.0152	-38.408
16 / 16	12870	-5.5712	-11.14224	-16.71344	-22.28464	-27.85568	-33.42688	-38.99808	-44.56912

將表 3-3 的能量除以總晶格數，表示成單位晶格的能量繪成圖 3-10。在圖形中可以看見，J/t=0.5 的曲線與圖 3-1 中 U 很大時的曲線是類似的，表示在小 J 時，t-J 模型與 Hubbard 模型有類似的性質。當

J 逐漸增加，能量與電子密度的關係越來越呈線性，此現象與所謂的相分離態有。當相分離態發生之後，所有的電子都聚在一起，能量正比於電荷數目。

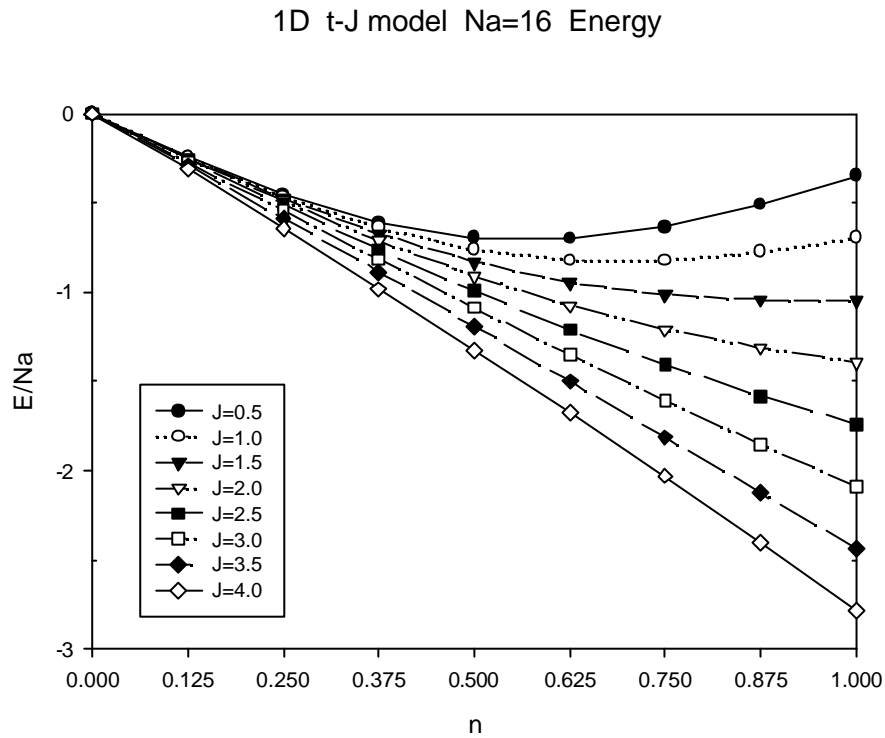


圖 3 - 10 1D Na=16 t-J 模型單位晶格能量圖

### 相分離態(Phase separation)

t-J 模型在 J 遠大於 t 時，電子會聚集在一起，因為此種組態的反鐵磁鍵最多，此種狀態稱為相分離態。其中電子聚集的區域完全沒有電洞為海森堡反鐵磁區，此區域中只有自旋交互作用的磁能；另外一個區域包含了全部的電洞，此區域除了自旋交互作用的磁能外，還包

含了電子在晶格中跳躍的動能<sup>25</sup>。

在此定義壓縮係數(compressibility)

$$k = \frac{N_a}{Ne^2} \left/ \left[ \frac{E(Ne+2) + E(Ne-2) - 2E(Ne)}{4} \right] \right.$$

$E(N)$  為在基態時有  $Ne$  個電子在  $N_a$  個晶格上的能量(電子密度  $n = Ne/N_a$ )，給出了真實熱力學上的壓縮係數，除非多電子的束縛態已經形成。當相分離發生時，在熱力學極限下  $1/k = 0$ 。基本上在相分離態的電子很難跳躍，這種狀態的導電性很差，更不用說產生超導態，所以相分離和超導態是互斥的，一維 t-J 模型的相分離邊界約發生在  $2.8 < J < 3.6$  之間。

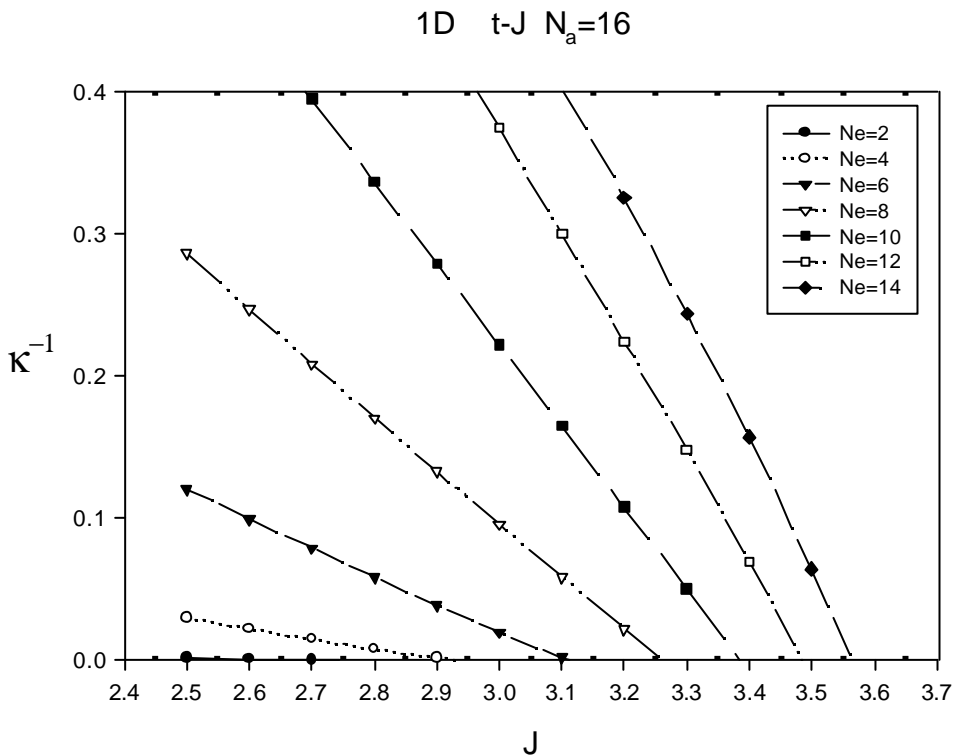


圖 3-11 壓縮係數的倒數對 J 作圖

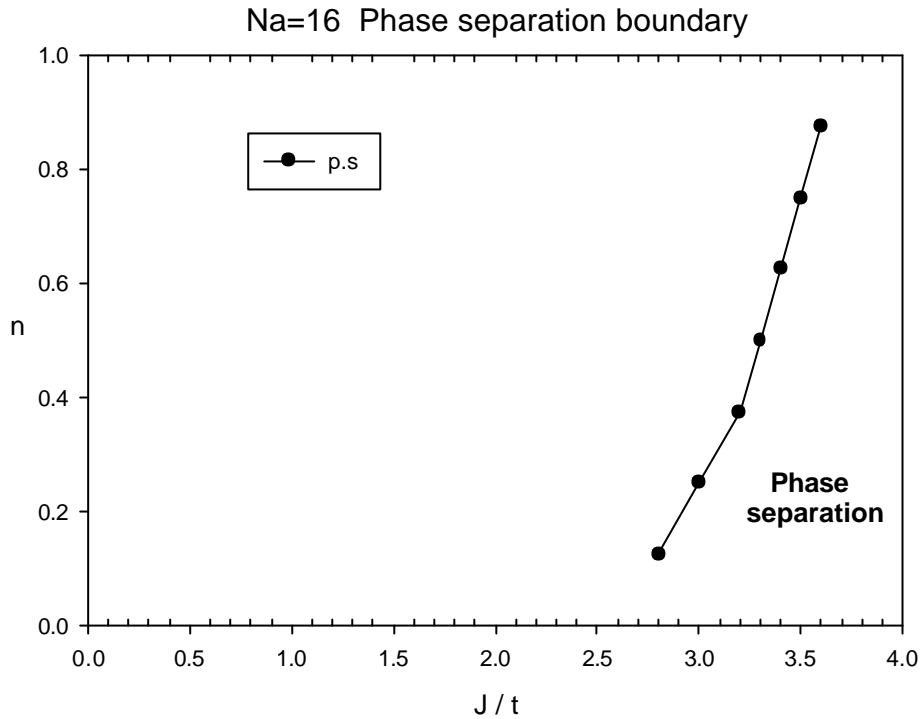


圖 3-12 t-J 模型的相分離邊界

### 結構因子 (spin structure factor)

圖 3-12 是 t-J 模型的自旋與電荷結構因子，對於 Na=12，Ne=6 當  $J/t=2$  時，出現平台，當  $J/t < 2$  時自旋關聯函數主導 (spin dominant)，此結果與之前 TLL 理論所描述的，在  $K_r < 1$  時，自旋關聯主導是一致的，當  $J/t$  一直增加到相分離態產生時， $D(\frac{2p}{L})$  出現峰值<sup>26,27</sup>。

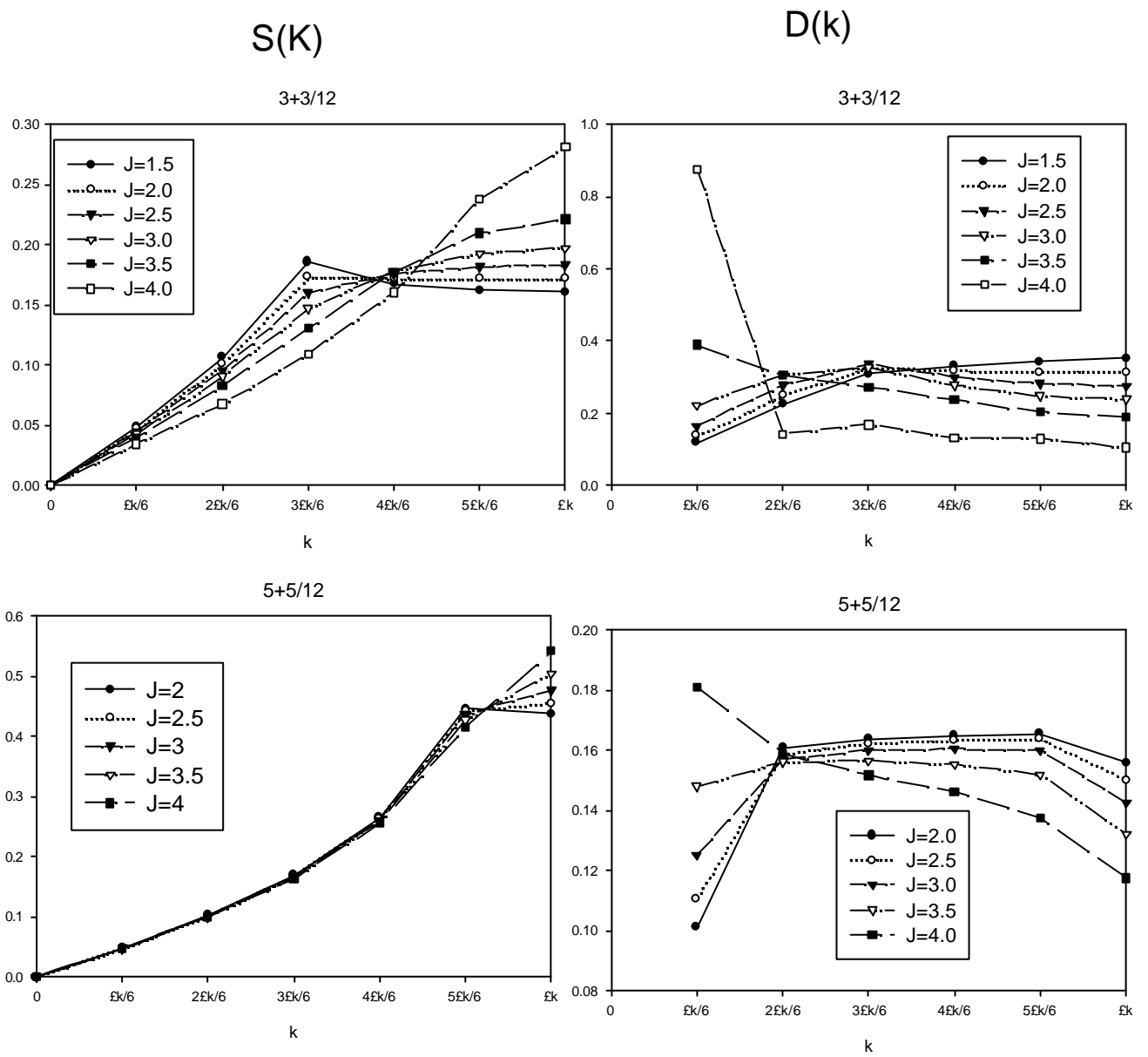


圖 3-13 t-J 模型之電荷結構因子

## 臨界指數(Critical exponent)

在動量空間中最低的電荷激發態是將費米面上的一個電子向外移動一步，此時總動量  $k = 2\mathbf{p}/N_a$ ，電荷激發能量

$E(k = 2\mathbf{p}/N_a) - E(k = 0)$ ，電荷傳播速度  $v_c$  定義為：

$$v_c \equiv \left. \frac{\partial E_c}{\partial k} \right|_{k \rightarrow 0} = \frac{E(k = 2\mathbf{p}/N_a) - E(k = 0)}{2\mathbf{p}/N_a} \dots\dots\dots (3.1)$$

我們知道當動量空間處於基態時，總動量  $Q=0$ ，此時真實空間電子組態會有平移對稱性。現在我們要求激發態，在具有平移對稱性的真實空間電子組態加入一個相位

$$|\mathbf{a}_N\rangle = e^{iQ(N-1)} |\mathbf{a}_1\rangle, \quad Q = 2\mathbf{p}/N_a$$

即動量空間總動量  $Q = 2\mathbf{p}/N_a$ 。再將我們的漢米爾頓量  $H_{t-J}$  作用在所得到的激發態波函數，就可以得到  $E(k = 2\mathbf{p}/N_a)$

臨界指數  $K_r$  與  $v_c$ 、 的關係式：

$$\frac{1}{n^2 k} = \frac{\mathbf{p}}{2} \frac{v_c}{K_r} \dots\dots\dots (3.2)$$

對於晶格數 16， $J=2t$ ，的臨界指數和電荷傳播速度，我們得到的結果如圖 3-13 與 1991 年 M. Ogata 等的研究結果一致。



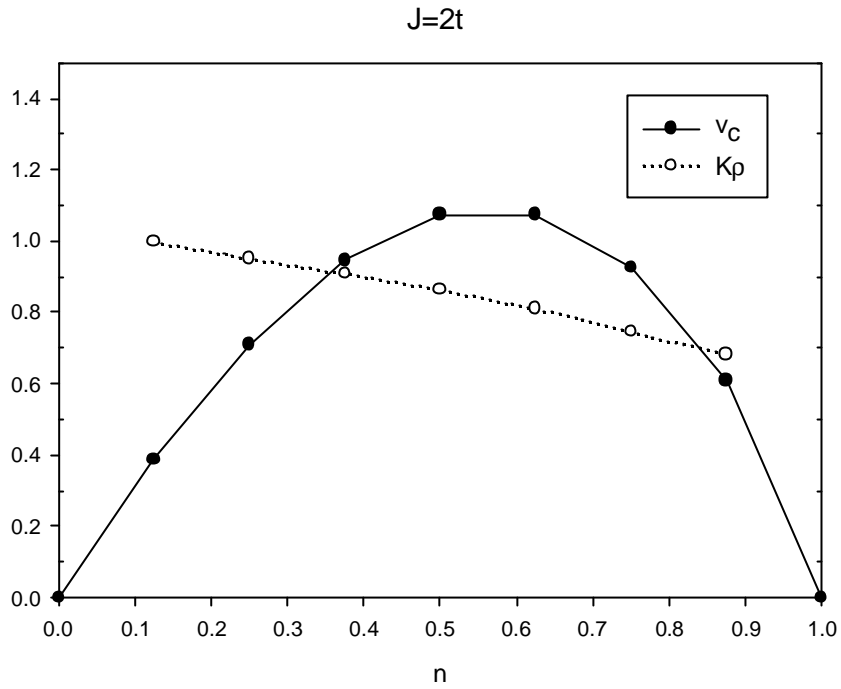


圖 3-14  $Na=16$ 、 $J=2t$  臨界指數與電荷傳播速度

圖 3-14 是  $J=3t$  時，在低電子密度時已經產生相分離態， $K_r \rightarrow \infty$ 。

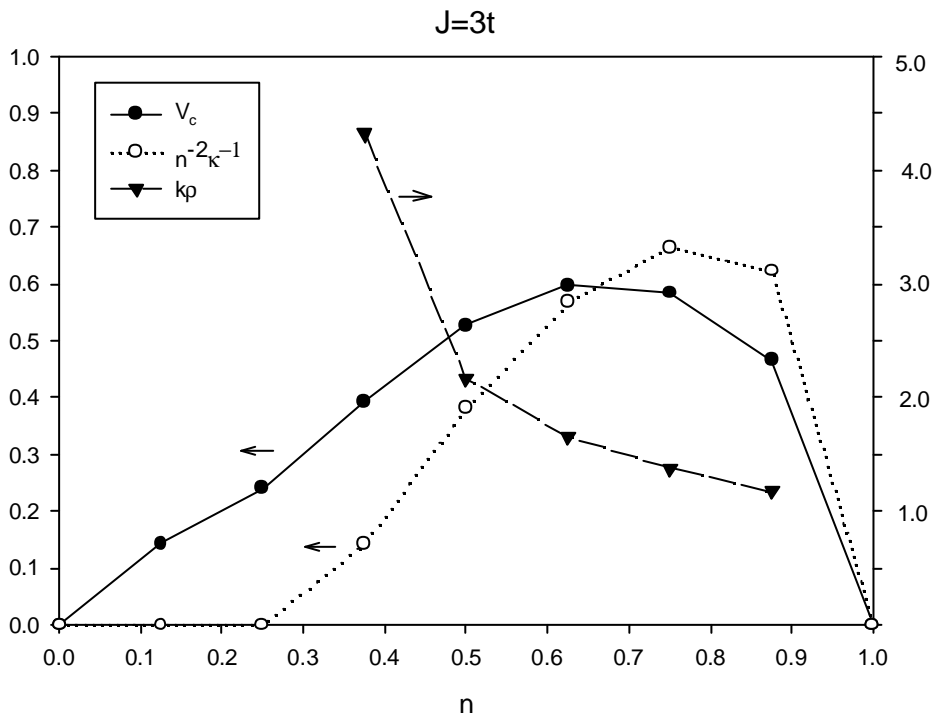


圖 3-15  $Na=16$ 、 $J=3t$  臨界指數與電荷傳播速度

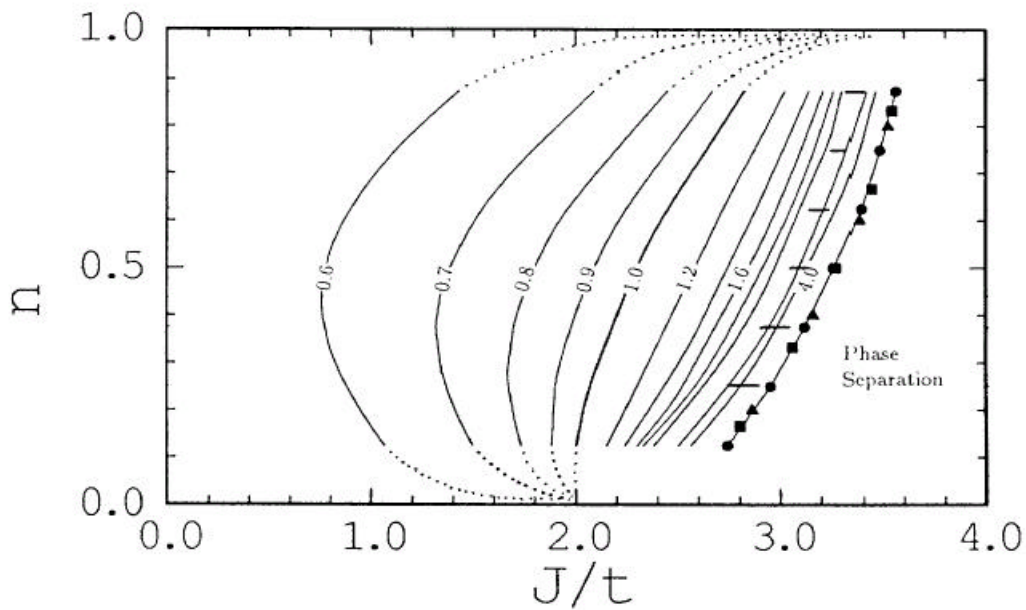


圖 3-16 Ogata 得到的 t-J 模型的相圖

圖 3-15 為我們所得到的相分離邊界與 Ogata 的相分離邊界一致<sup>12</sup>，在 Ogata 的研究中發現，t-J 模型在低電子密度時可能存在自旋能隙，後來的研究結果證實了自旋能隙果然是存在的。

### VMC 的數值結果

以上所陳述的是用直接對角化的結果，對於研究 t-J 模型的基態性質還有一個有趣的研究方法是變分蒙地卡羅法。如下圖 3-16 為用 HM 波函數研究 t-J 模型得到最好的參數時的相圖<sup>23</sup>：

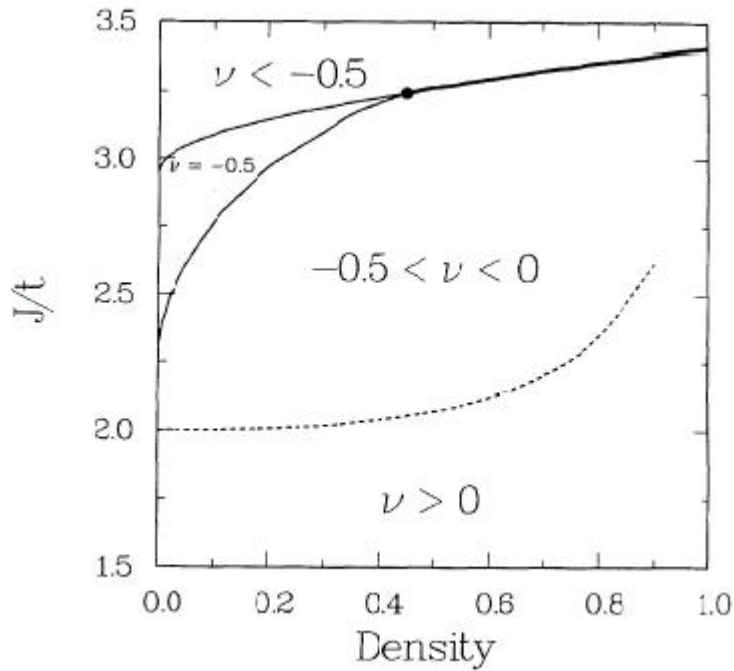


圖 3-16 HM 波函數對於 t-J 模型研究的相圖

$n$  和 t-J 模型的臨界指數  $k_r$  存在一個關係式:

$$k_r = \frac{1}{2n + 1} \dots\dots\dots (3.3)$$

當  $n < -0.5$  就產生相分離，虛線是  $n = 0$ ，對應於  $k_r = 1$ 。在低電子密度區有一整塊  $n = -0.5$  是最好的波函數，當時推論這個區域可能存在自旋能隙<sup>28</sup>。但是後來的研究發現 HM 波函數是沒有自旋能隙的，之後關於自旋能隙的問題有更深入的研究。

### 自旋單態配對波函數(Singlet Pair Wave function)

我們知道當關聯函數不是以冪次方(power law)遞減，而是以指數函數遞減(exponential decay)時，系統會有所謂的關聯長度(correlation

length) $x$  , 其定義如下:

$$S(r) \sim e^{-\frac{r}{x}}$$

根據場論的計算

$$\Delta_s \propto \frac{1}{x}$$

當我們研究自旋能隙的問題時, 必須找到一個有限的 $x$ , 否則 $\Delta_s \rightarrow 0$ , 但在 $n = -0.5$ 的波函數中,  $x \rightarrow \infty$ , 所以在研究自旋能隙上出現瑕疵。

在 1993 年, Y.C.Chen 和 T.K.Lee 寫下了一個更好的波函數, 當系統的電子對密度很低時, 我們可以用這個波函數來描述<sup>29</sup>, 即自旋單態配對波函數(Singlet Pair Wave function)

$$|SP\rangle = \sum_c \left\{ \left( \frac{2t}{J} \right)^r b_r^+ \right\}^{\frac{Ne}{2}} |0\rangle$$

$$b_r^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_{i\uparrow}^+ C_{i+r\downarrow}^+ - C_{i\downarrow}^+ C_{i+r\uparrow}^+)$$

這個波函數很強的優勢是沒有調變參數(tuning parameter), 而直接以

$\frac{2t}{J}$  來取代。將 SP 波函數的結果和 HM 波函數的結果比較發現

$E(SP) < E(n = -0.5)$ , 根據變分的原則, 得到比較低能量的就比較接近

基態<sup>30</sup>。

## 自旋能隙相 (spin gap phase)

由變分法的研究發現，一維 t-J 模型在低電子密度的時候有自旋能隙產生。1997 年，M. Nakamura 獲得了自旋能隙的相邊界，他們發現此自旋能隙所存在的區間比先前的研究來的大，甚至於超過  $n=0.5$  也存在自旋能隙相。

以下我們簡介 M. Nakamura 分析自旋能隙相邊界的方法<sup>31,32</sup>，當一維的邊界條件如  $c_{i+L,S}^+ = e^{if} c_{i,S}^+$  等於是通量  $f$  穿過這個一維環。當電子數  $N=4m+2$  時採取周期性邊界條件 (Periodic Boundary Condition)， $f=0$ ， $c_{i+1,S}^+ = c_{i,S}^+$ 、電子數  $N=4m$  時採取反週期性邊界條件 (Antiperiodic Boundary Condition)， $f=p$ ， $c_{i+1,S}^+ = -c_{i,S}^+$ ，這組邊界條件稱為「封閉邊界條件」 (closed shell boundary condition)，這樣的選擇會使得動量空間上的費米動量是完全佔據，可以得到基態能量  $E_0$ 。

當我們想要研究系統的激發態時，M. Nakamura 等人透過「重整化群 (Renormalization Group)」的分析，得到的結論是：當採取下列邊界條件： $N=4m$ ， $f=0$ ； $N=4m+2$ ， $f=p$ ，研究系統的自旋激發態，自旋單態第一激發態 (singlet excitation) 和自旋三重態第一激發態 (triplet excitation)，這兩個能級會隨著  $J$  的變化產生交錯 (Level-crossing)

的情況。根據重整化群還有 Luttinger 液體的理論可以證明，此交錯發生的點就是自旋能隙打開的臨界耦合  $J_{s.g.}$ 。

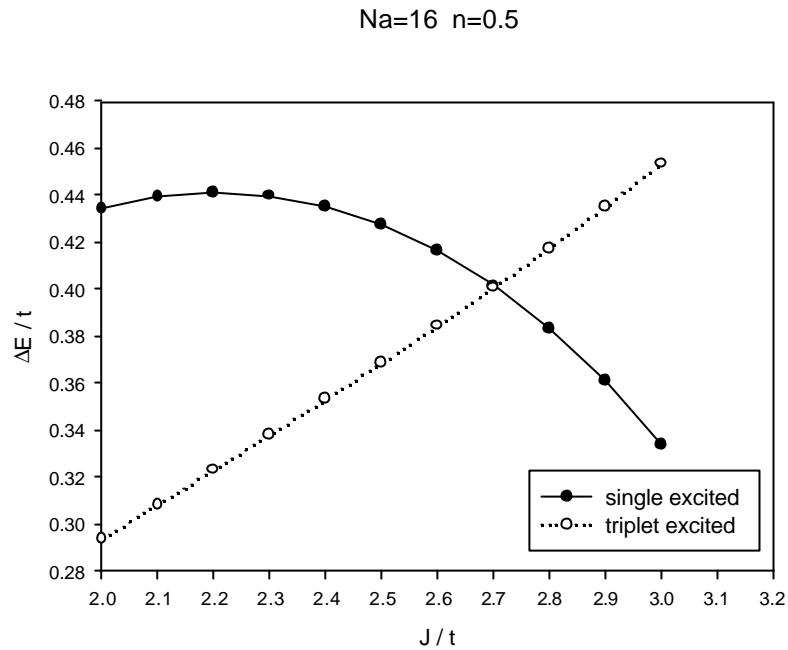


圖 3-17 自旋激發能級交錯(level-crossing)

圖 3-17 重作了 M. Nakamura 1997 年的數值結果，當  $J$  很小時系統的自旋三重態是能量最低的激發狀態，自旋單態則是在更高能量的激發態，當  $J$  逐漸增大，這兩個能級會在  $J=2.7$  的地方交錯。在  $J>2.7$  後，自旋單態成為最低的能量狀態， $J=2.7$  就對應到系統的臨界耦合常數  $J_{s.g.}$ ，因此我們可以利用此方法求出在不同電荷密度的自旋能隙相邊界。

## 相圖

圖 3-18 是  $t$ - $J$  模型的相圖, 我們所得到的結果與 M.Nakamura<sup>33</sup> 的結果一致。

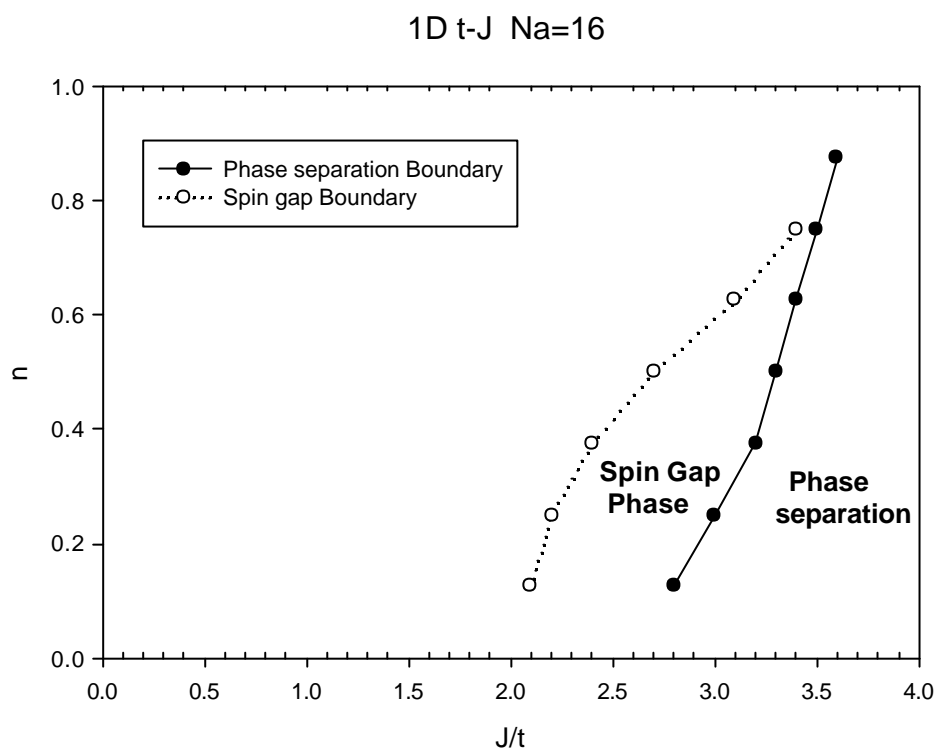


圖 3-18  $t$ - $J$  模型相圖

## 第4章 t-J-V 與 t-J-U 的數值結果

關於 Hubbard 模型和 t-J 模型的研究已經得到比較完整的結論，由本章我們將陳列對 t-J-V 以及 t-J-U 模型的初步研究結果，主要探討此兩模型是否存在自旋能隙以及相分離態。

### 4.1 t-J-V 模型

t-J-V 模型即在  $H_{t-J}$  外再加上短程的庫倫斥力，漢米爾頓量：

$$H_{t-J-V} = H_{t-J} + V \sum_i n_i n_{i+1}$$

圖 4-1 為  $V=1$  時的能量分佈圖：

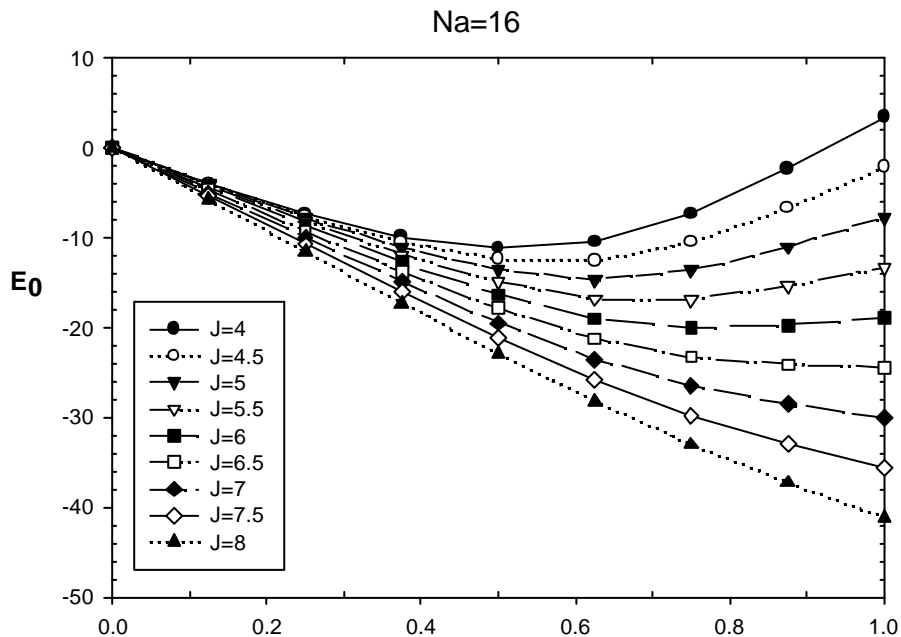


圖 4-1 t-J-V 模型在  $V=1$  時基態能量



圖 4-2 為 1993 年，M. Troyer 等在 quarter-filling 晶格數為 16 時，對於不同  $V/t$  和  $J/t$  時得到的相圖。實線為  $K_r$ ，虛線為自旋能隙。

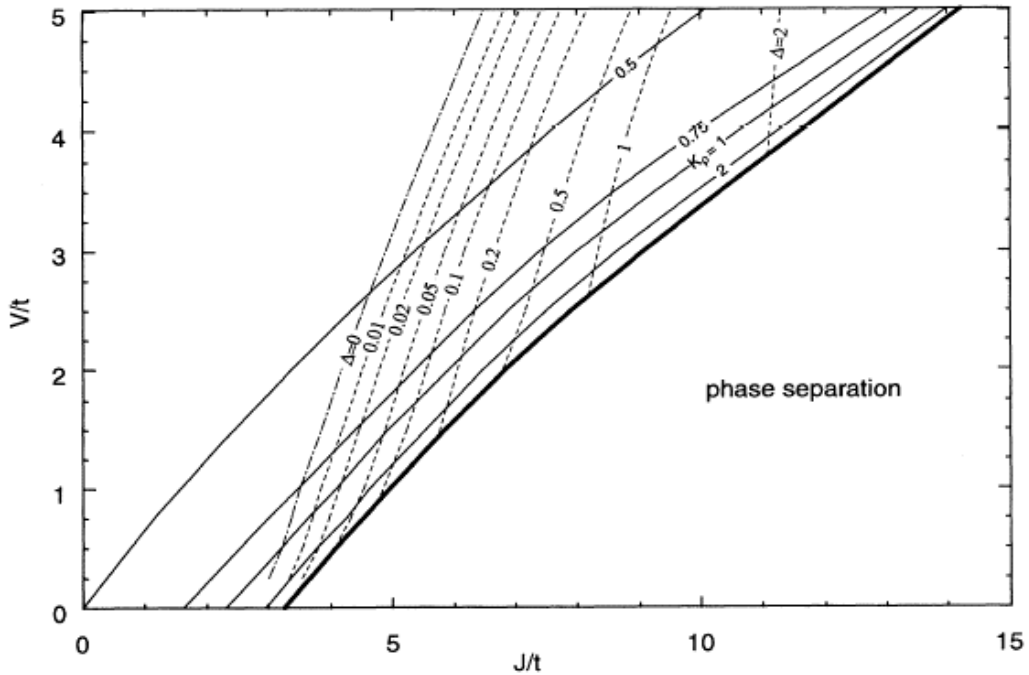


圖 4-2 t-J-V model 相圖

$V=1$  時，在  $J/t=3.5$  時產生自旋能隙， $J/t=5$  相分離， $V=3$  時， $J/t=4.7$  產生自旋能隙， $J/t=9.1$  相分離。我們用壓縮系數的方法所到的相分離邊界與 M. Nakamura 的方法得到的自旋能隙與以上結果一致。

圖 4-3 為  $V=1$  時的相圖，自旋能隙在  $J/t=3.1$  時產生，相分離態在  $4.7 < J/t < 5.6$  之間產生。

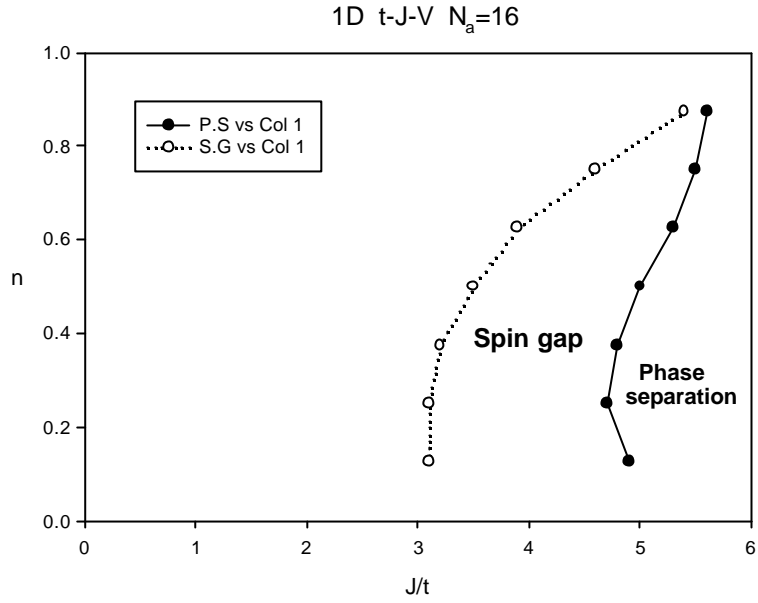


圖 4-3 t-J-V 模型相圖 (V=1)

圖 4-4 為  $V=3$  的相圖， $J/t > 9$  才發生相分離， $J/t > 5$  時自旋能隙時產生。

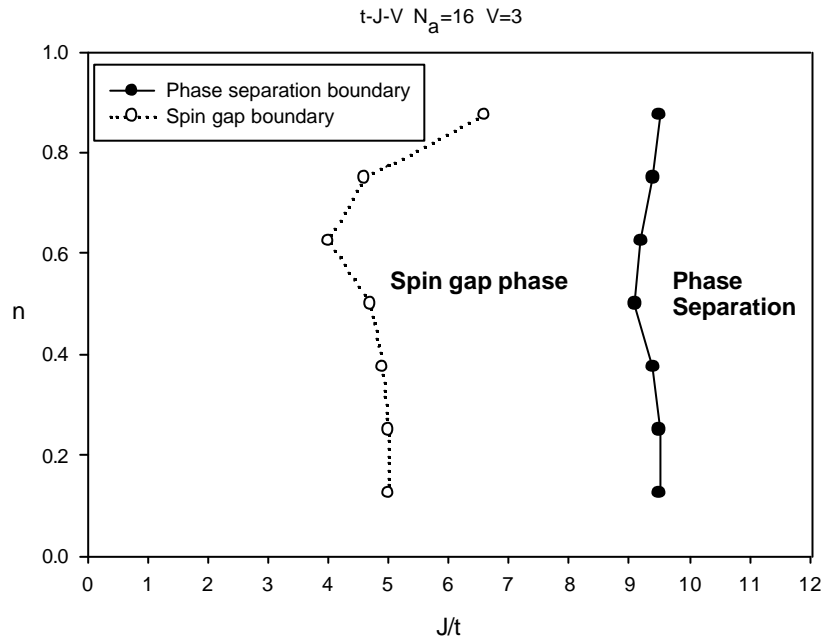


圖 4-4 t-J-V 模型之相圖 (V=3)

分別對  $V=1$ 、 $V=3$  我們研究其自旋、電荷還有 Pairing 的結構因子。

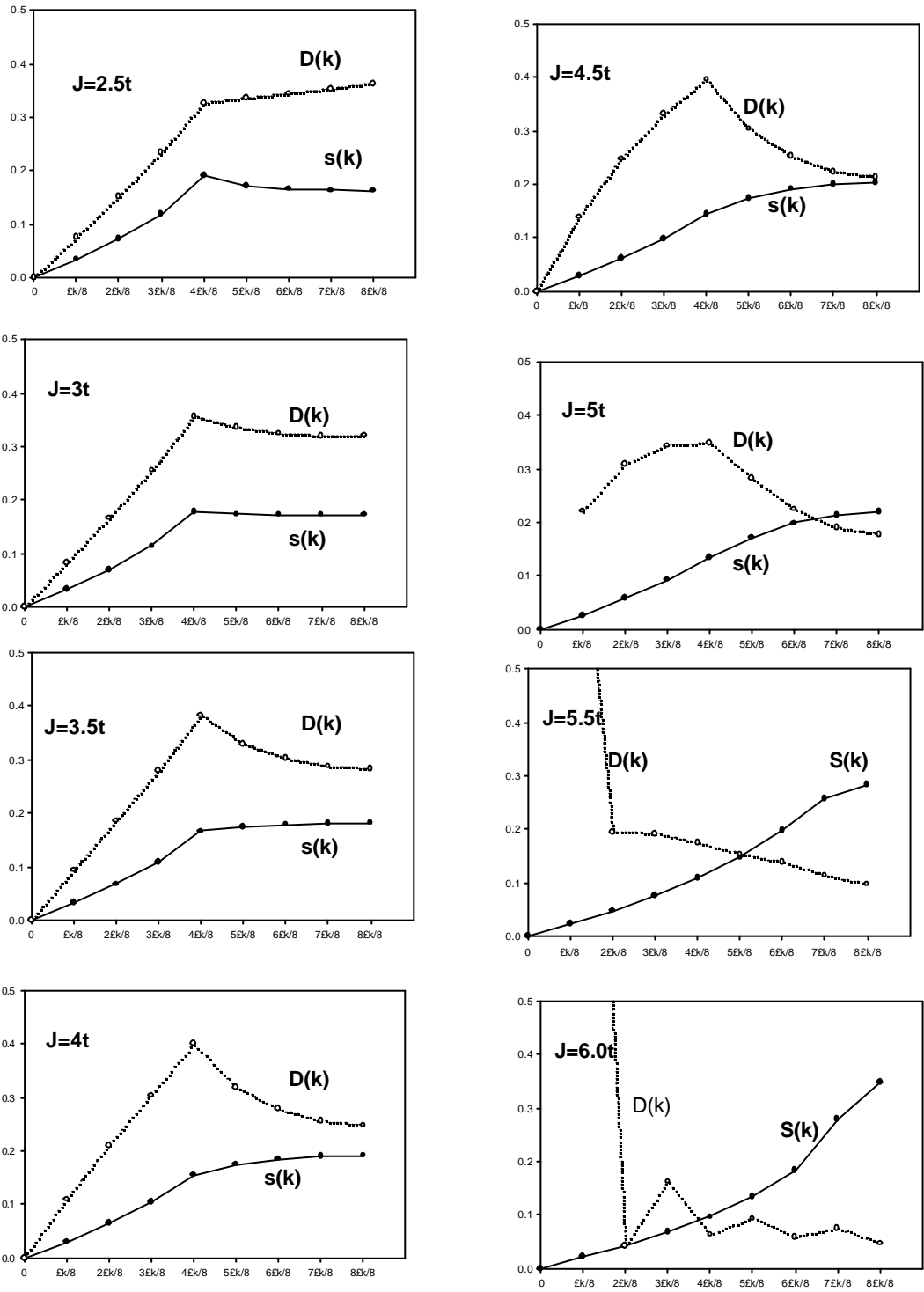


圖 4-5  $4+4/16$  ( $V=1$ )自旋與電荷結構因子

圖 4-5 為 t-J-V 模型在  $V/t=1$  時，自旋結構因子隨  $J/t$  變化圖，由 Tomonaga-Luttinger 液體理論告訴我們， $K_r < 1$  時，spin dominant，自旋結構因子在  $2k_F$  處會產生峰值，而在  $V/t=1$  的 t-J-V 模型中，自旋能隙打開即  $J/t > 3$  後，電荷結構因子開始在  $2k_F$  處產生峰值，此時 charge dominant，一直到  $J/t > 5$  產生相分離。

圖 4-6 為  $V/t=1$  時的 pairing 結構因子，當  $J/t > 4.2$  後  $K_r > 1$ ，Pairing dominant，此時在  $p(0)$  出現峰值。

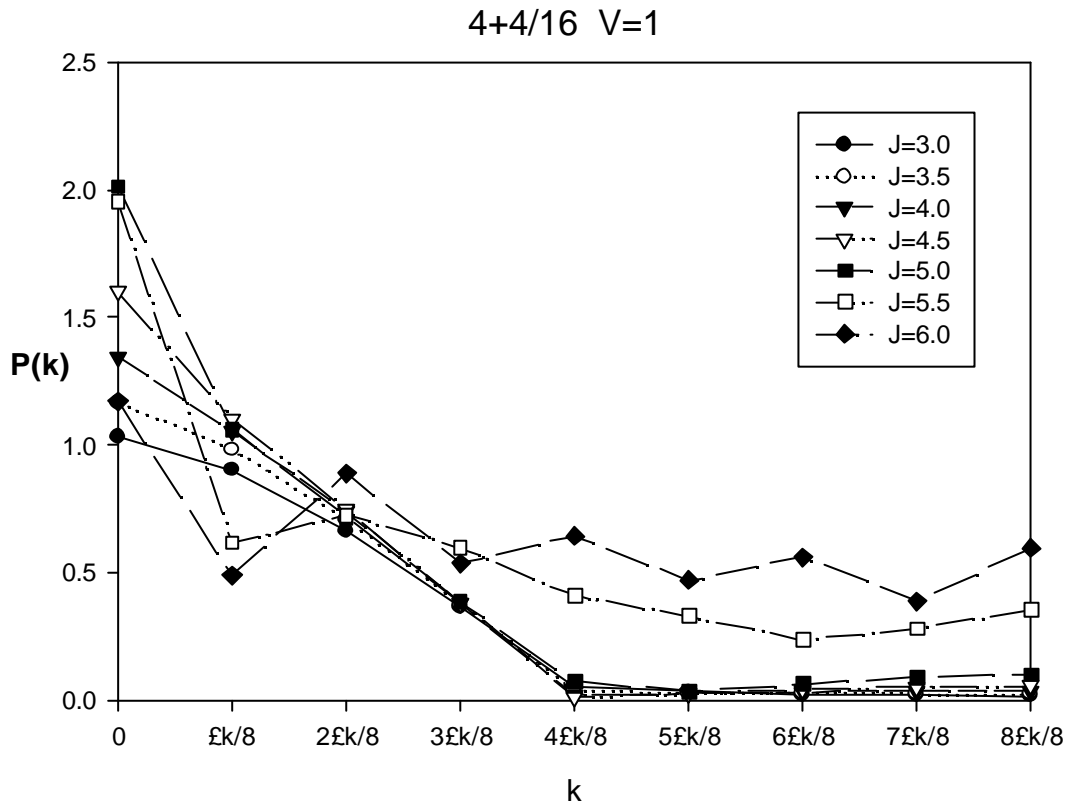


圖 4-6 t-J-V ( $V=1$ ) 的  $P(k)$

圖 4-7 為  $V/t=3$  時的自旋與電荷結構因子。  $J/t < 5$  時， $K_r < 1$ ， $S(k)$  在  $2k_F$  有峰值，spin dominant。在  $J/t=5$  時因為已經產生自旋能隙， $D(k)$  在  $2k_F$  產生峰值，所以 charge dominant。  $J/t=8$  左右， $K_r = 1$ ，由圖 4-8， $J/t > 8$  後， $P(0)$  產生峰值，pairing dominant， $J/t > 9$  相分離產生。

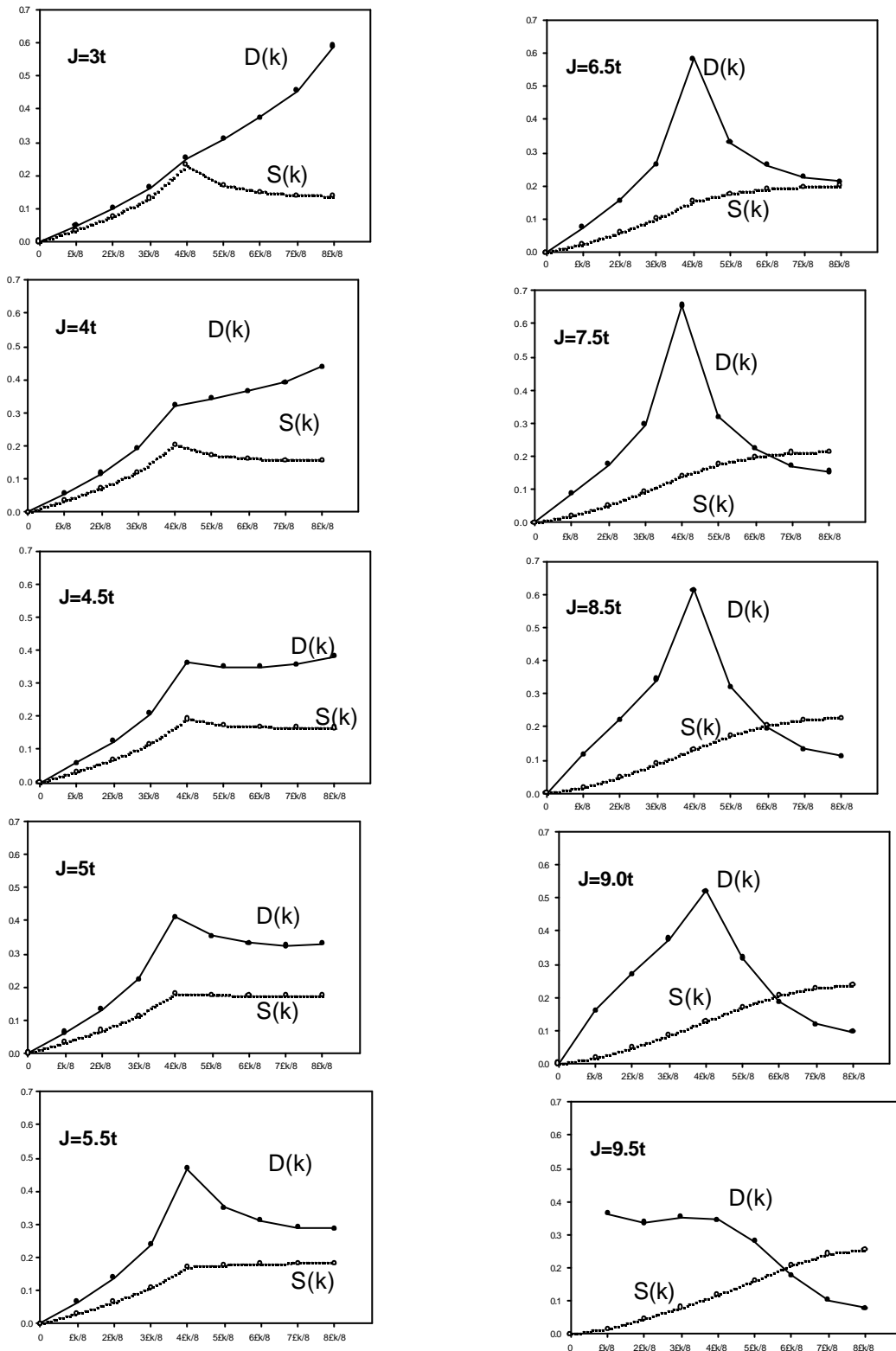


圖 4-7  $4+4/16$  ( $V=3$ )自旋與電荷結構因子

4+4/16 V=3

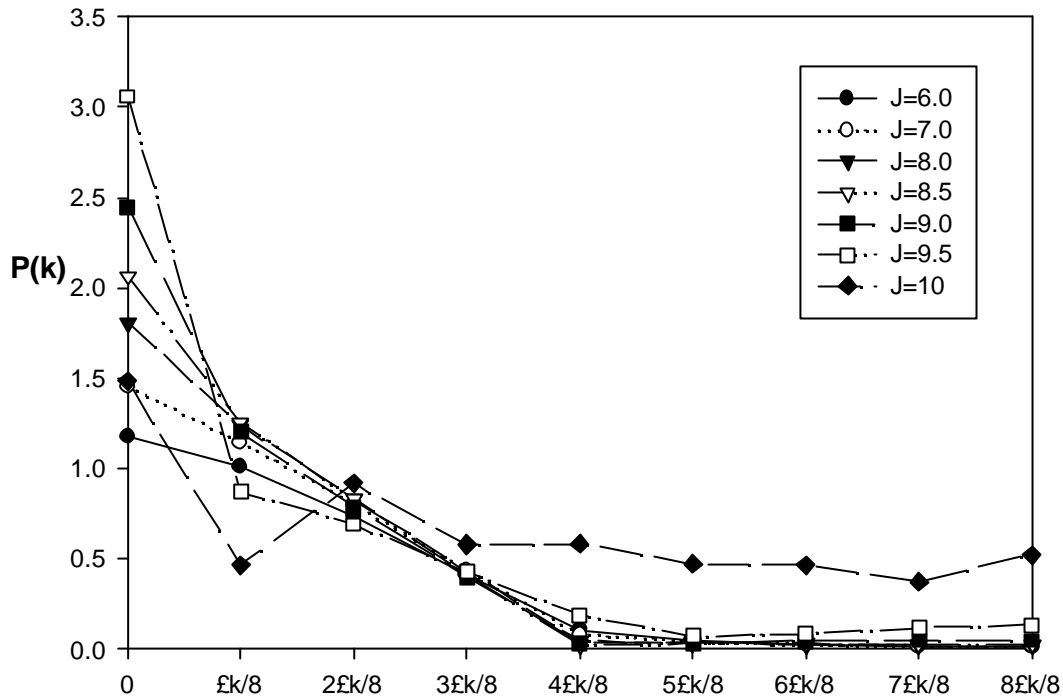


圖 4-8 t-J-V (V=3) 的 P(k)

排斥的交互作用如預期的將相分離邊界往較大  $J/t$  的方向移動，同時打開較廣的前緣區，在此區出現增強的超導關聯性。

我們可以在定性上描述 t-J-V 模型的物理圖像：由前面的研究已知，在 t-J 模型當  $J \gg 2t$  以上，電子會開始被配對成自旋單態，當更大的 J 時，電子就聚集在同一區成為海森堡鏈。此時我們加入了 V 項的排斥力， $V \sum_i n_i n_{i+1}$ ，在近鄰的電子會使系統能量上升，因為 J 項的緣故，電子喜歡被配對使系統能量下降，在 J 與 V 彼此競爭下就形成一對一對互相分開的電子，此時需要更大的 J 才會產生相分離。

## 4.2 t-J-U 模型

在之前研究的 Hubbard 模型, t-J 模型, 在與真實材料對應後, 似乎並不能很好的解釋材料產生超導的條件。於是我們去除 t-J 模型中不允許雙佔據的限制, 並引入 Hubbard 模型中的庫倫排斥力(on site Coulomb repulsion)U, 企圖在此 t-J-U 模型中找到不同於 Hubbard 和 t-J 模型的物理性質。 t-J-U 模型的漢米爾頓量如下:

$$H_{t-J-U} = -t \sum_{\langle i,i+1 \rangle, s} (c_{i,s}^+ c_{i+1,s} + h.c) + J \sum_{\langle i,i+1 \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

以下我們陳列研究的初步數據做為參考。

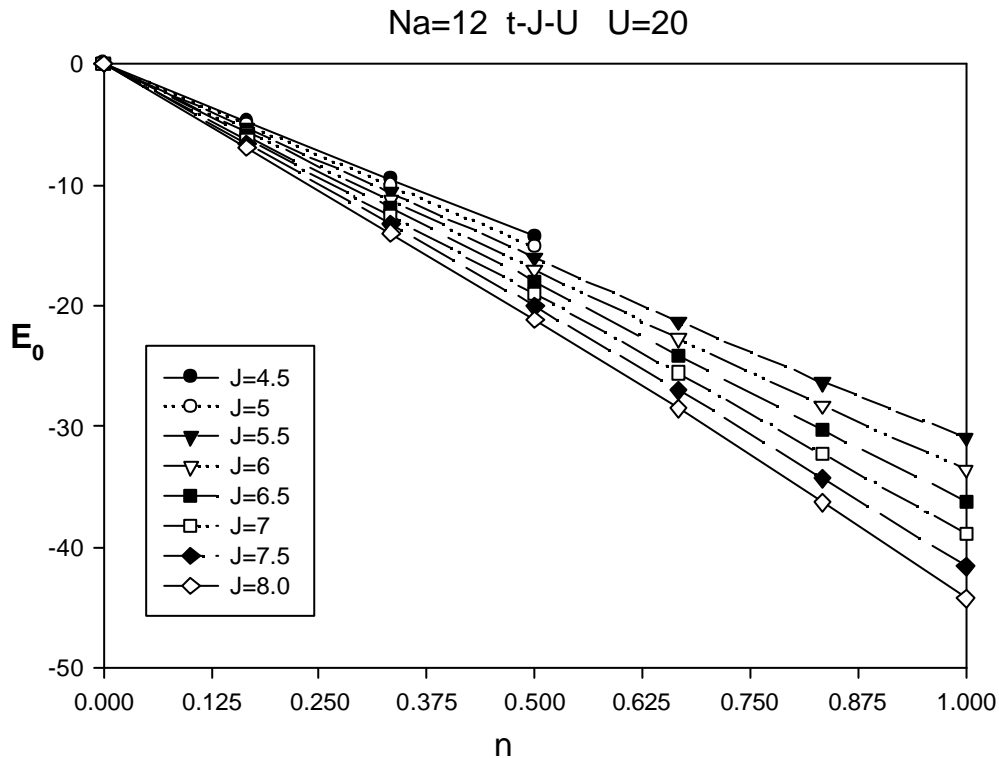
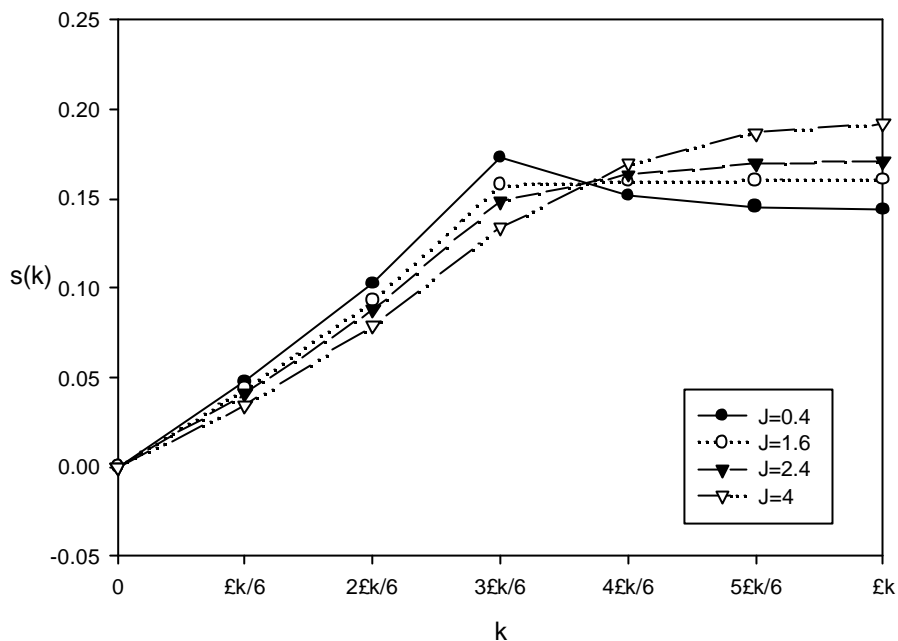


圖 4-9 t-J-U 模型能量分佈(U=20)

# 自旋結構因子(Spin Structure factor)

3+3/12 U=4 s(k)



3+3/12 U=20 s(k)

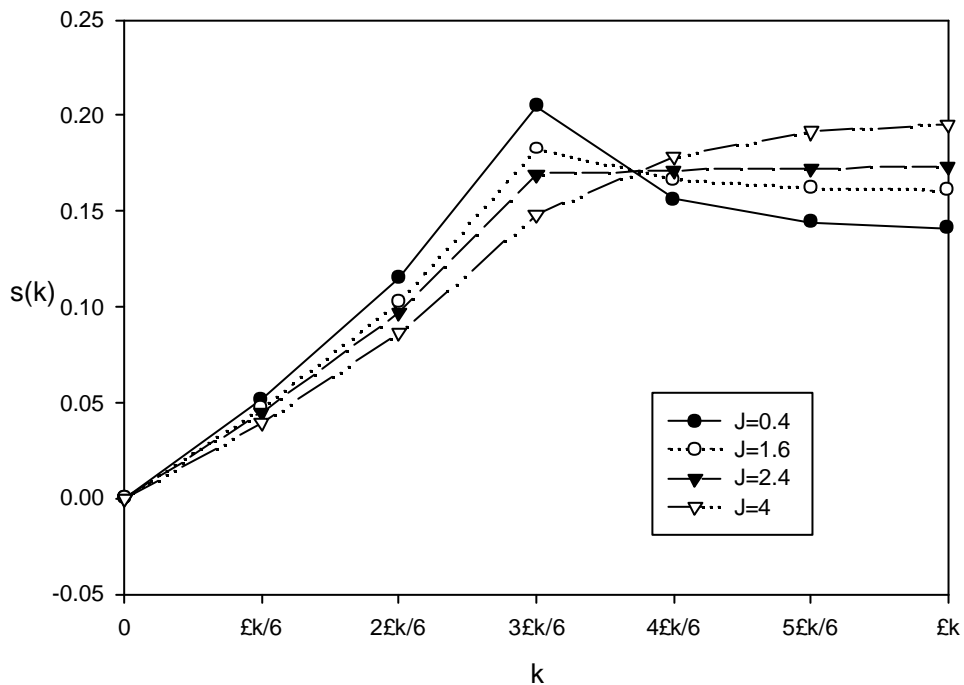


圖 4-10 t-J-U 模型之自旋結構因子



# 電荷結構因子(Charge structure factor)

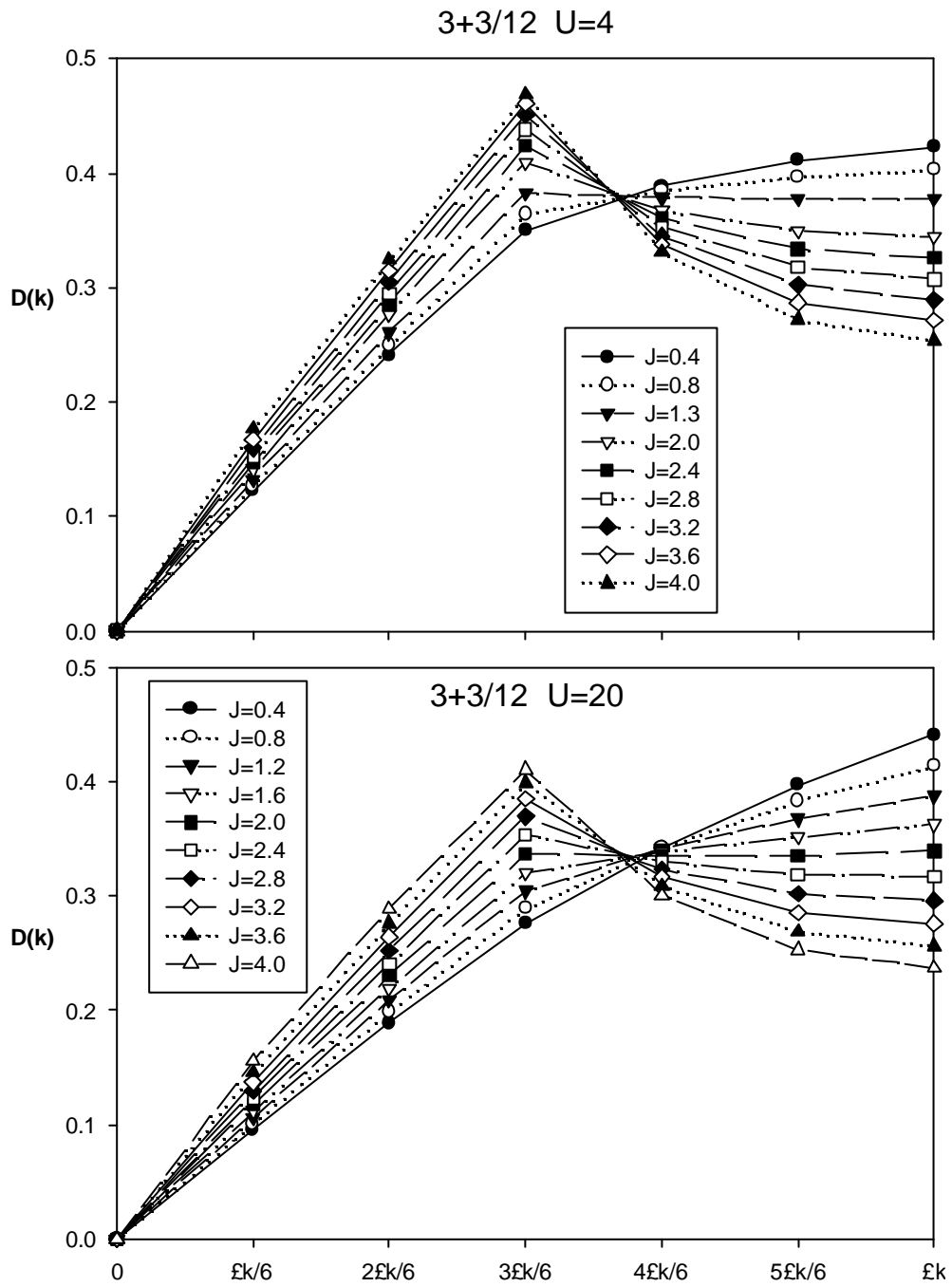
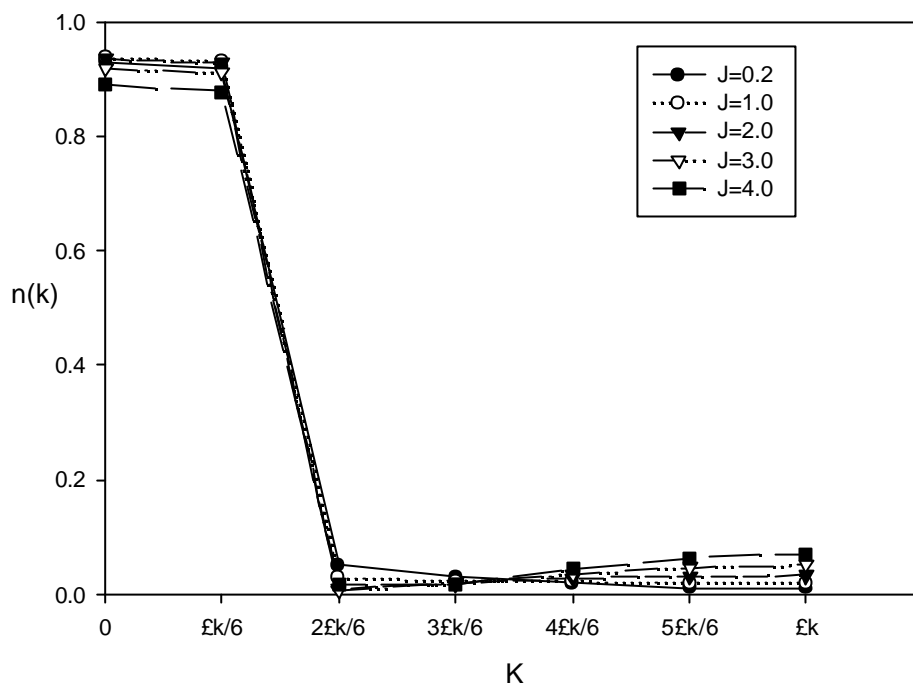


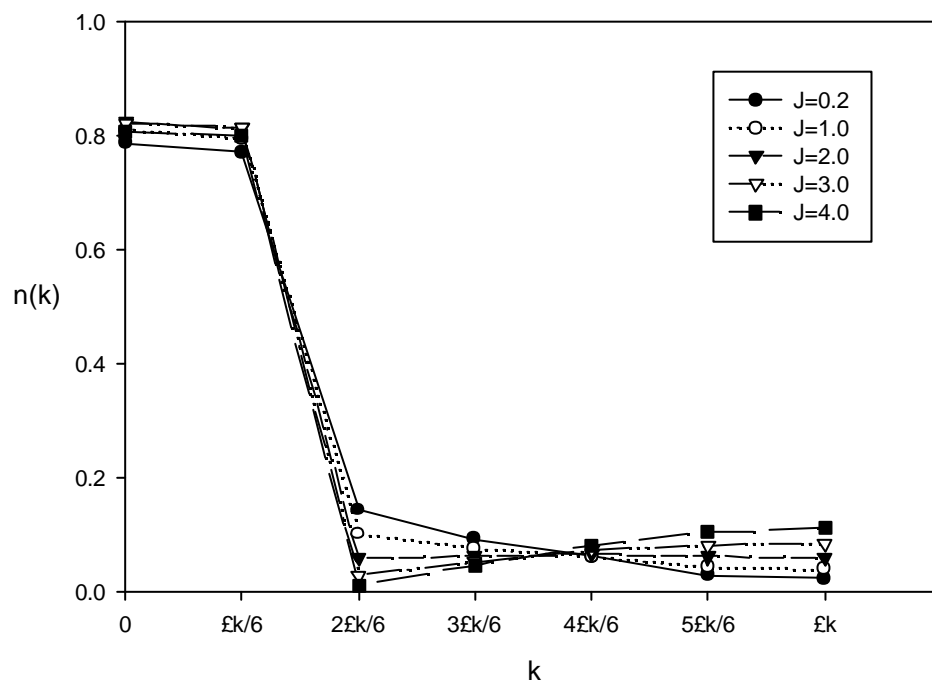
圖 4-11 t-J-U 模型之電荷結構因子

# 單電子動量分佈(Momentum distribution)

3+3/12 U=4



3+3/12 U=20



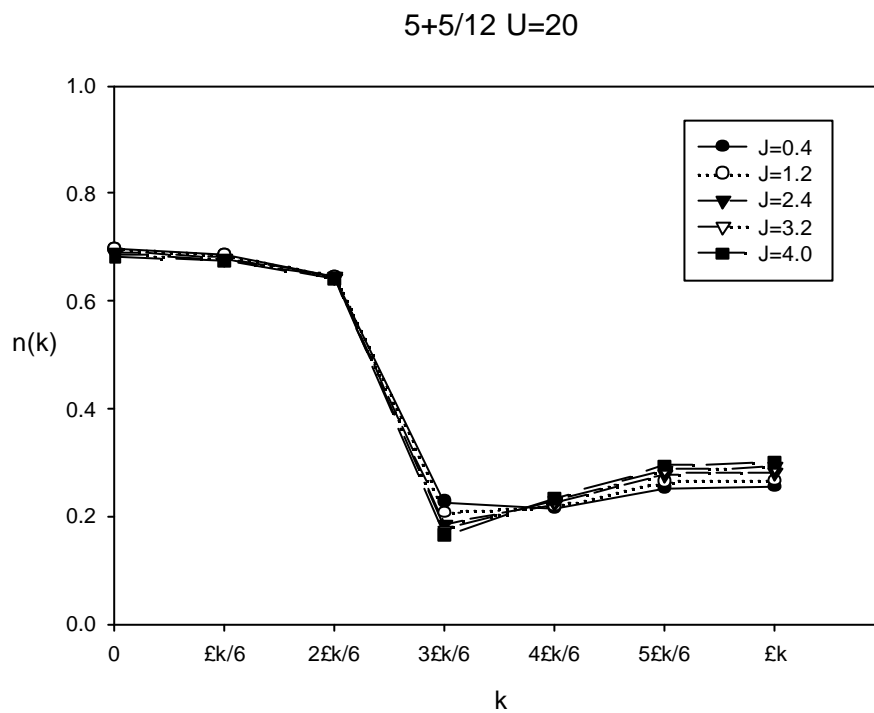
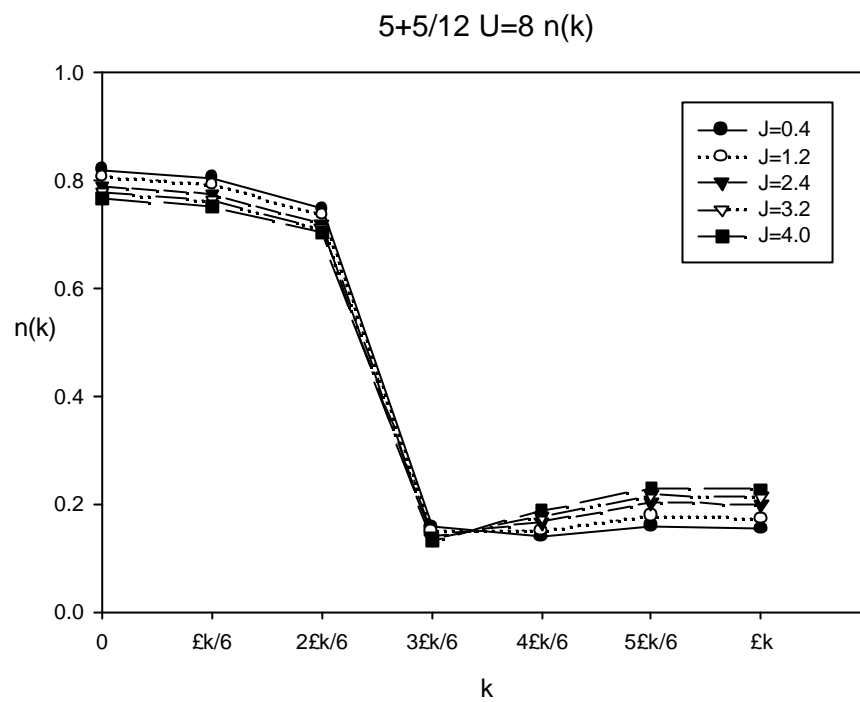


圖 4-12 t-J-U 模型之單電子動量分佈

1D t-J-U Na=12

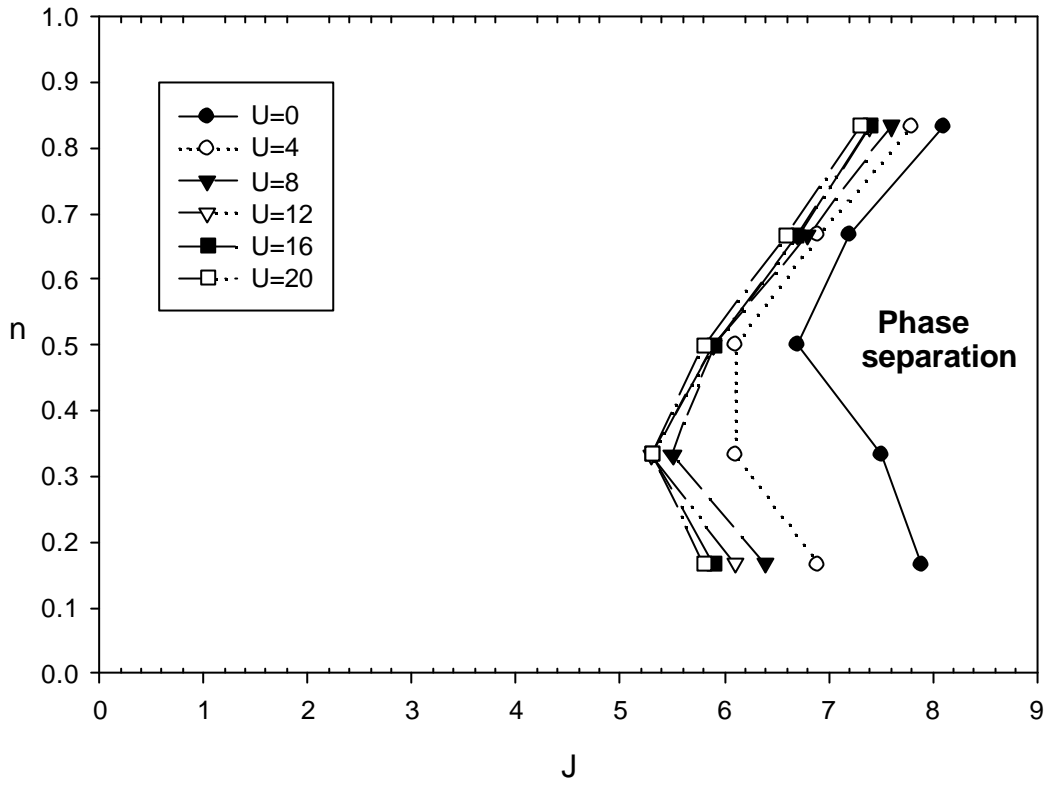


圖 4-13 t-J-U model 相分離邊界

## 第5章 結論

我們將在本章對以上所陳列的數值結果中做一些結論，並且對於 t-J-V 及 t-J-U 模型簡述未來仍需要繼續的研究工作。

### Hubbard 模型

在  $U=0$  時，此模型近似於自由電子費米氣體，存在明顯的費米面， $k > k_F$  時，單電子動量分佈為零，當  $U$  增加時，單電子動量分佈在費米動量  $k_F$  的不連續跳躍變緩，此結果與 Tomonaga-Luttinger 液體所預測的，在  $k_F$  呈 power law 的行為是一致的。

當  $U > 0$  時， $s(k)$  在  $2k_F$  出現峰值且隨著  $U$  增大表示 spin dominant。當  $U \rightarrow \infty$  時，在半填滿狀態系統是反鐵磁絕緣體，此時 Hubbard 模型等效於 t-J 模型。

### t-J 模型

$2.8 < J/t < 3.6$  之間存在相分離態。在小於臨界  $J$  值(系統的  $K_r < 1$ ) 時，spin dominant，大於臨界  $J$  值，charge dominant。在  $J/t > 2$  到相分離態之間存在自旋能隙相，隨著電子密度增加，需要更大的  $J$  才會產生相分離及自旋能隙。

## t-J-V 模型

$V=1$  時，自旋能隙在  $J/t=3.1$  時產生，相分離態在  $4.7 < J/t < 5.6$  之間產生。在  $V=3$  時，短程的庫倫斥力使得相分離區一直到  $J > 9t$  才發生， $J > 5t$  時發生自旋能隙相。

在 t-J 模型中，自旋能隙都在  $K_r > 1$  的範圍裡，在這個區間中只有兩個關聯函數  $D(r)$ 、 $P(r)$  是幕次方遞減(power law decay)，自旋關聯函數  $S(r)$  是指數函數衰減，且因為在  $K_r > 1$  的範圍中所以是  $P(r)$  主導。在 t-J-V 模型中，當自旋能隙打開後，一直到  $K_r = 1$  的區間我們發現是 charge dominant 的區間。

## t-J-U 模型

1. 當  $U$  增加時，單電子動量分佈在  $k_F$  不連續處變緩，為 TLL 行為。 $J$  增加時，動量較高處分佈增加。
2. 當  $J < J_s$  spin dominant 。
3. 存在自旋能隙相。
4. 存在相分離態。

未來所需繼續的研究工作是用更大的晶格求出電荷傳播速度，定出臨界指數  $k_r$ ，在小  $J$  的區域的物理性質仍須更進一步研究。

## 參考文獻

---

- 1 M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, Rev. Mod. Phys **70**,1039
- 2 J. Hubbard, Proc.Roy.Soc. (London),Ser. **A276**,238 (1963),and **A277**, 237(1964)
- 3 M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett **10**,159 (1963), and Phys. Rev. **134**, A923 (1964)
- 4 E. Fradkin, “Field Theories of Condensed Matter Systems”,Chapter 2 (1991)
- 5 E. H. Lieb, F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett **20**,1445 (1968)
- 6 J. G. Bedoncz and K. A. Mueller, Z. Phys. B **64**,189(1986)
- 7 P. W. Anderson, Science **235**,1196(1987)
- 8 E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1(1991)
- 9 A. Luther and V. J. Emery, Phys. Rev. Lett **33**, 589(1974)
- 10 M. Oagata, H. Shiba, Phys. Rev. B **41**,2326 (1990)
- 11 “Ground state properties of strongly correlated fermion system”, C. S. Hellberg, dissertation for degree of Doctor of Philosophy (1993)
- 12 M. Ogata, M. Luchini, S. Sorella, F. Assaad, Phys. Rev. Lett **66**,2388 (1991)
- 13 Y. C. Chen, Physica C **364-365**,113(2001)
- 14 「低摻雜高溫超導體的異常行為」, 施奇廷, 李定國, 物理雙月刊十八卷六期, 一九九六年十二月。
- 15 吳明駿 Tung-Hai Univ Master thesis(2000)
- 16 B. S. Shastry and B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**,964(1981)
- 17 J. C. Bonner, W. J. Bolte, Phys. Rev. B **25**,6959(1982)
- 18 T. Barnes, E. Dagotto and J. Riera, E. S. Swanson, Phys. Rev. B **47**,3196(1993)
- 19 C. Lanczos, J.Res.Nat.Bur.Stand **45**,255
- 20 J.K.Cullum and R.A.Willoughby, Lanczos algorithm for large symmetric eigenvalue computations(1985)
- 21 E. Dagotto, Rev. Mod. Phys **66**,763 (1994)

- 
- 22 W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran
  - 23 C.S. Hellberg and E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. **67**,2080(1991)
  - 24 P. W. Anderson, Science **256**, 1526 (1992)
  - 25 V. J. Emery, S. A. Kivelson and H. Q. Lin, Phys. Rev. Lett **64**,475(1990)
  - 26 W. O. Putikka, R. L. Glenister and R.R. P. Singh and H. Tsunetsugu, Phys. Rev. Lett **73**,170(1994)
  - 27 F. F. Assaad and D. Wurtz, Phys. Rev. B **44**,2681(1991)
  - 28 C. S. Hellberg and E. J. Mele, Phys. Rev. B **48**,646(1993)
  - 29 Y. C. Chen and T. K. Lee, Phys. Rev. B **47**,11548(1993)
  - 30 Y. C. Chen and T. K. Lee, Phys. Rev. B **54**,9062(1996)
  - 31 M. Nakamura and K. Nomura, Phys. Rev. B **56**,12840(1997)
  - 32 M. Nakamura, K. Nomura and A. Kitazawa, Phys. Rev. B **60**,7850(1999)
  - 33 M. Nakamura, K. Nomura, A. Kitazawa, Phys. Rev. Lett. **79**,3214 (1997)