

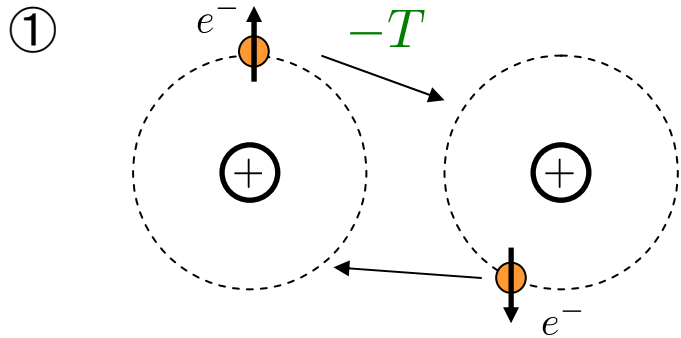
## 体験研究紹介(米満グループ)

-Charge Transfer Instability with Structural Change  
[by Y. Toyozawa, JPSJ **50**, 1861 (1981)] を読んで-

\* \* 大学 \* \* 部 \* \* 学科

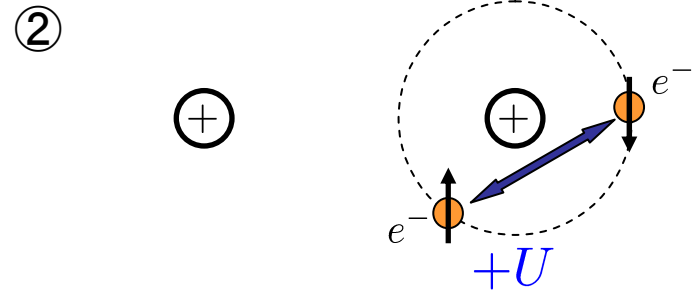
\* \* \* \*

# モデル: ①~④の4つの効果が競合する模型



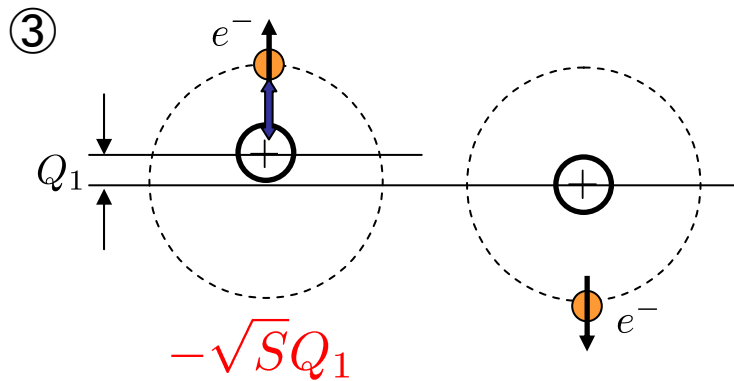
軌道の重なりによる安定化

$$\mathcal{H}_T = -T \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma})$$



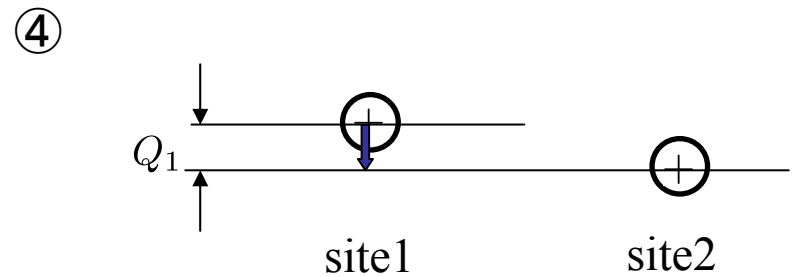
クーロン斥力(二重占有状態を不安定化)

$$\mathcal{H}_U = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



格子と電子の相互作用( $Q \neq 0$ を安定化)

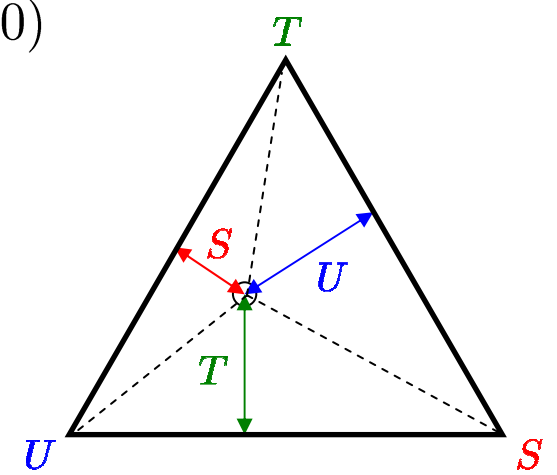
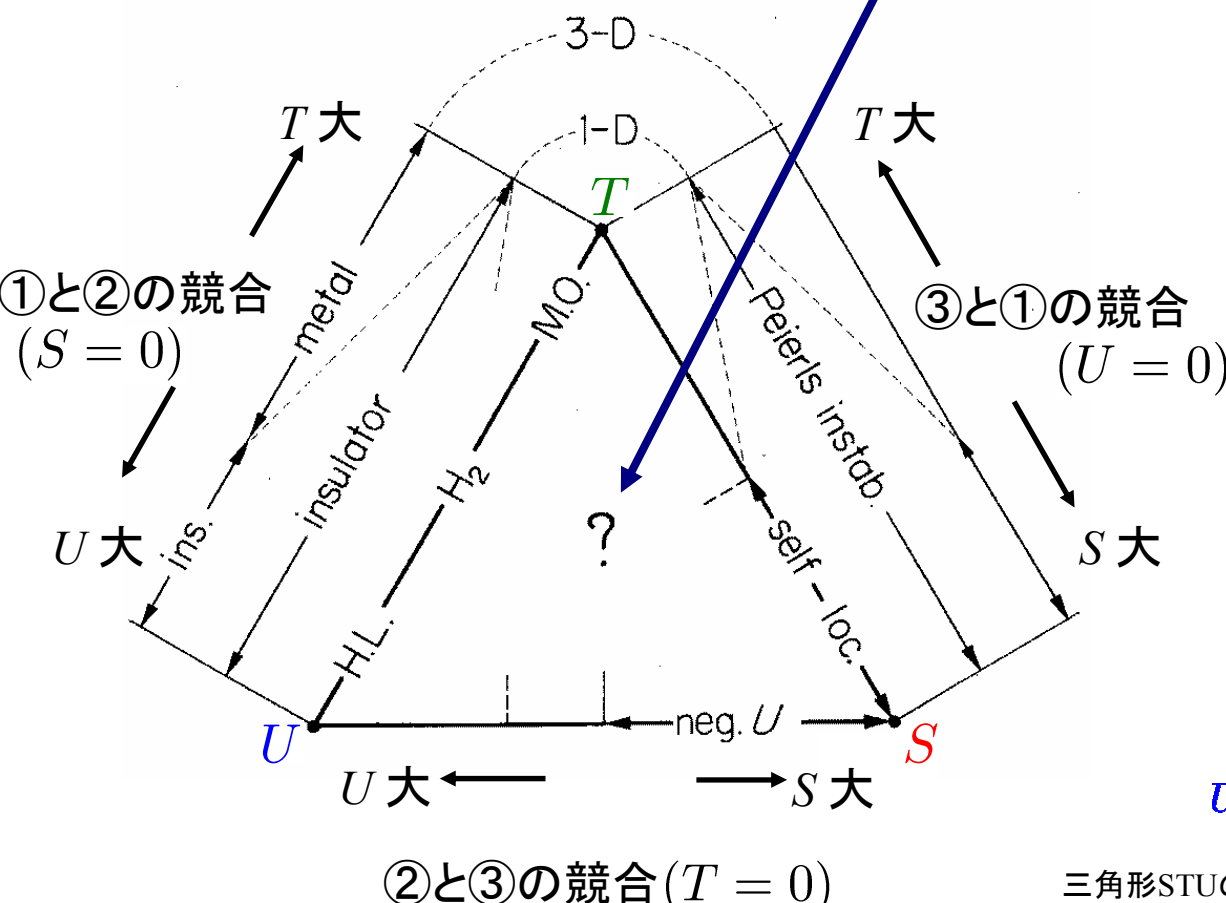
$$\mathcal{H}_S = -\sqrt{S} \sum_{i\sigma} Q_i \cdot n_{i\sigma}$$



ポテンシャルエネルギー( $Q \neq 0$ を不安定化)

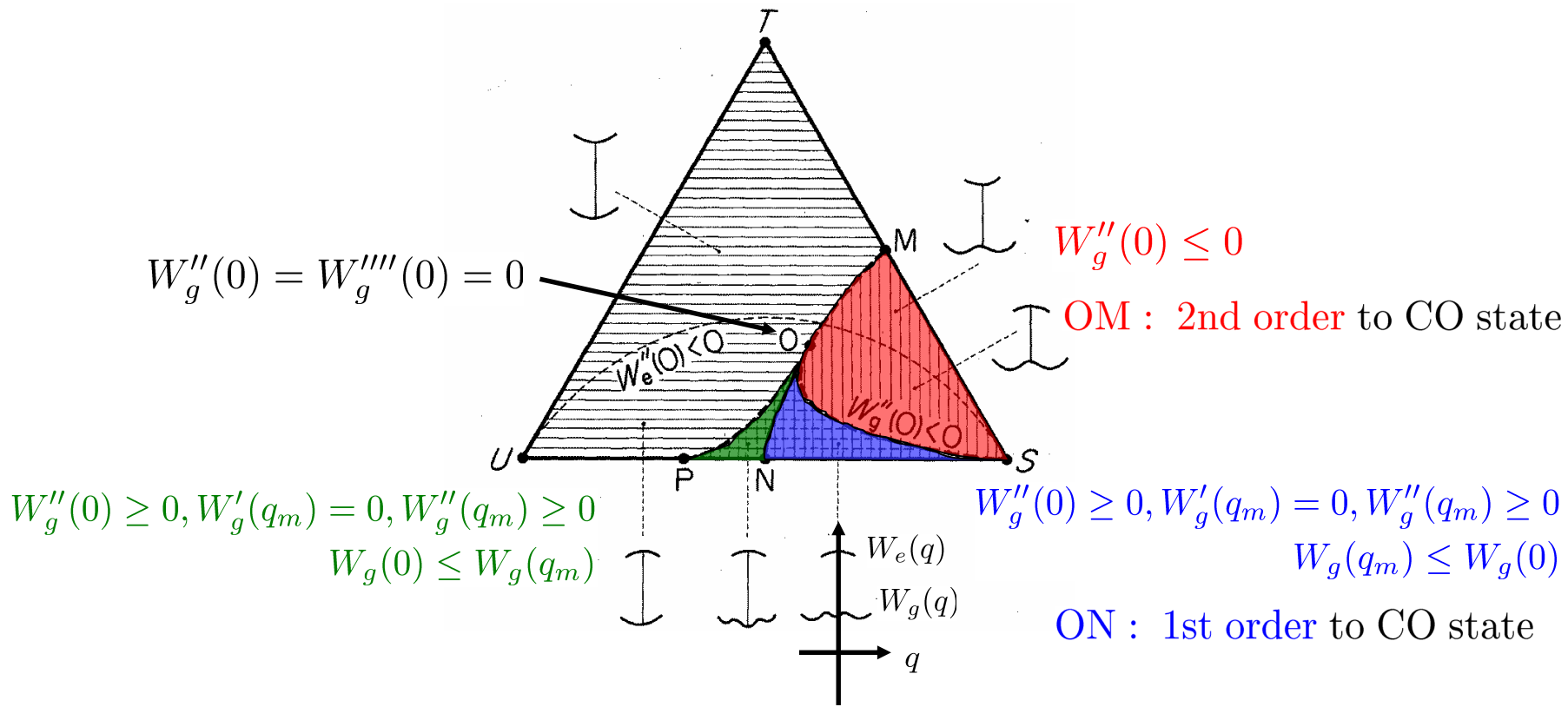
$$\mathcal{H}_L = \frac{1}{2} \sum_i (\omega^2 P_i^2 + Q_i^2)$$

目標: 前頁のモデルに対し、この?の部分の構造を探り相図を描く



三角形STUの面積 =  $\frac{\sqrt{3}l^2}{4} = (S + T + U) \times l/2$   
 $\implies S + T + U = \frac{\sqrt{3}l}{2}$

結果：各領域に対して  $q - W_g(q), W_e(q)$  図が以下の様に描けることが分かった



- $W_g$  : 基底状態のエネルギー
- $W_e$  : 励起状態のエネルギー
- $q = \sqrt{\frac{S}{2}} \langle \nu \rangle$ , ( $q = (Q_1 - Q_2) / \sqrt{2}$ ,  $\nu = n_1 - n_2$ )