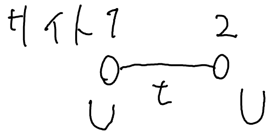
8. ハバード模型、ハイゼンベルグ模型

8.1 2サイト系



$$\hat{H} = t\sum_{\sigma}\left(\hat{c}^{\dagger}_{2\sigma}\hat{c}_{1\sigma} + \hat{c}^{\dagger}_{1\sigma}\hat{c}_{2\sigma}\right) + U\sum_{j=1}^{2}\hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}$$

多体状態数（ヒルベルト空間次元）

グランドカノニカル集団（電子数可変） 0個〜4個

2サイト×2スピンに電子が有るor無し → $2^4=16$通り

$2\uparrow\ 2\downarrow\ 1\uparrow\ 1\downarrow$			
$\vert 0000\rangle$	$\vert 0100\rangle$	$\vert 1000\rangle$	$\vert 1100\rangle$
$\vert 0001\rangle$	$\vert 0101\rangle$	$\vert 1001\rangle$	$\vert 1101\rangle$
$\vert 0010\rangle$	$\vert 0110\rangle$	$\vert 1010\rangle$	$\vert 1110\rangle$
$\vert 0011\rangle$	$\vert 0111\rangle$	$\vert 1011\rangle$	$\vert 1111\rangle$

多体ハミルトニアン 16×16 行列

・保存量とブロック対角

① 全電子数 $N=\sum_{j\sigma} n_{j\sigma}$: 0、1、2、3、4

② 全スピン $S=\frac{1}{2}\sum_{j}(n_{j\uparrow}-n_{j\downarrow})$: -1、$-\frac{1}{2}$、0、$\frac{1}{2}$、1

ある多体基底に作用させた時、別のN、Sに移り変わらない

※ハバードモデルにする前の、一般の多体ハミルトニアンでも同じ

$N=0$	$S=0$	$\|0000\rangle$
$N=1$	$S=-\frac{1}{2}$	$\|0001\rangle$ $\|0100\rangle$
	$S=+\frac{1}{2}$	$\|0010\rangle$ $\|1000\rangle$
$N=3$	$S=-\frac{1}{2}$	$\|0111\rangle$ $\|1101\rangle$
	$S=+\frac{1}{2}$	$\|1011\rangle$ $\|1110\rangle$
$N=4$	$S=0$	$\|1111\rangle$

$N=2$	$S=-1$	$\|0101\rangle$
	$S=0$	$\|0011\rangle$ $\|0110\rangle$ $\|1001\rangle$ $\|1100\rangle$
	$S=1$	$\|1010\rangle$

・全エネルギー固有値

(1) $N=0$、$S=0$　　$N=4$、$S=0$　　$N=2$、$S=-1$　　$N=2$、$S=+1$

$E_{0000}=0$、$E_{1111}=2U$、$E_{0101}=0$、$E_{1010}=0$

(2) $N=1$、$S=-\frac{1}{2}$

$$\hat{H}|0001\rangle = t\,c_{2\downarrow}^{\dagger}c_{1\downarrow}c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle = t\,c_{2\downarrow}^{\dagger}|0\rangle = t|0100\rangle$$

$$\hat{H}|0100\rangle = t\,c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{2\downarrow}c_{2\downarrow}^{\dagger}|0\rangle = t\,c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle = t|0001\rangle$$

$$\mathcal{H} = \begin{array}{cc} \begin{array}{cc} 0001 & 0100 \end{array} & \\ \begin{pmatrix} 0 & t \\ t & 0 \end{pmatrix} & \begin{array}{c} 0001 \\ 0100 \end{array} \end{array}$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0001\rangle - |0100\rangle) \Rightarrow E=-t$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0001\rangle + |0100\rangle) \Rightarrow E=t$

(3) $N=1$、$S=\frac{1}{2}$　$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0010\rangle - |1000\rangle) \Rightarrow E=-t$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0010\rangle + |1000\rangle) \Rightarrow E=t$

(4) $N=3$、$S=-\frac{1}{2}$

$$\mathcal{H}|0111\rangle = t\, c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow}\, c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle + U n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle$$

1回反交換

$$= -t\, c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle + U c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle$$

$$= -t|1101\rangle + U|0111\rangle$$

$$\mathcal{H}|1101\rangle = t\, c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}\, c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle + U n_{2\uparrow}n_{2\downarrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle$$

$$= t\, c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle + U c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle$$

1回反交換

$$= -t|0100\rangle + U|1101\rangle$$

ハミルトニアンをかけて、元の$c^\dagger$の順序($c_{2\uparrow}^\dagger \to c_{2\downarrow}^\dagger \to c_{1\uparrow}^\dagger \to c_{1\downarrow}^\dagger$)に戻すまでに何回反交換したか → 奇数回ならば$-1$が付く

$$\mathcal{H} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} 0111 & 1101 \end{array} \\ \begin{pmatrix} U & -t \\ -t & U \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} 0111 \\ 1101 \end{array}$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0111\rangle + |1101\rangle) \to E = U-t$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0111\rangle - |1101\rangle) \to E = U+t$

(5) $N=3$、$S=\frac{1}{2}$ $\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|1011\rangle + |1110\rangle) \to E = U-t$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1011\rangle - |1110\rangle) \to E = U+t$

(6) $N=2$、$S=0$

$$\mathcal{H} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} 0011 & 0110 & 1001 & 1100 \end{array} \\ \begin{pmatrix} U & -t & t & 0 \\ -t & 0 & 0 & -t \\ t & 0 & 0 & t \\ 0 & -t & t & U \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} 0011 \\ 0110 \\ 1001 \\ 1100 \end{array}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0110\rangle + |1001\rangle\right) \to E = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0011\rangle - |1100\rangle\right) \to E = U$$

規格化は省略

$$|0011\rangle + |1100\rangle + \frac{U}{4t}\left(1 + \sqrt{\left(\frac{4t}{U}\right)^2 + 1}\right)\left(|0110\rangle - |1001\rangle\right) \to E = \frac{U}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{4t}{U}\right)^2}\right)$$

$$|0011\rangle + |1100\rangle + \frac{U}{4t}\left(1 - \sqrt{\left(\frac{4t}{U}\right)^2 + 1}\right)\left(|0110\rangle - |1001\rangle\right) \to E = \frac{U}{2}\left(1 + \sqrt{1 + \left(\frac{4t}{U}\right)^2}\right)$$

$\frac{4t}{U} \ll 1$ のとき

$$E = \frac{U}{2}\left[1 \pm \left\{1 + \frac{1}{2}\left(\frac{4t}{U}\right)^2\right\}\right] = -\frac{4t^2}{U},\ U + \frac{4t^2}{U}$$

→ $N=2$ のときの基底状態 $|0110\rangle - |1001\rangle$

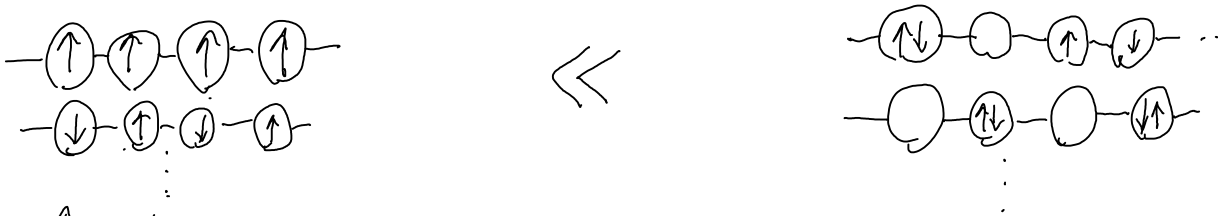
一重項状態 singlet $|\downarrow_2 \uparrow_1\rangle - |\uparrow_2 \downarrow_1\rangle$

8.2 Heisenberg モデル

ハイゼンベルグ

Half-filled (1サイトあたり1電子) で、$U \gg t$ のとき

エネルギー



↑基底状態、低エネルギー励起状態

この部分空間で、どの様な状態 (スピンは平行？反平行？重ね合わせ)？

・二次摂動 (強相関極限 $U \gg t$ から)

$$\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}$$

$$\mathcal{H}^{(1)} = \sum_{jj'\sigma} t_{jj'}\left(\hat{c}^{\dagger}_{j'\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + h.c.\right)$$ 摂動項

$\mathcal{H}^{(2)} = U\sum_j \hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow}$：非摂動項。固有状態は数状態

$$\cdots c_{2\uparrow}^{\dagger n_{2\uparrow}} c_{2\downarrow}^{\dagger n_{2\uparrow}} c_{1\uparrow}^{\dagger n_{1\uparrow}} c_{1\downarrow}^{\dagger n_{1\uparrow}}|0\rangle$$

固有エネルギー $E = U\sum_j n_{j\uparrow}n_{j\downarrow}$

⇓

基底状態は全サイトで $n_{j\uparrow}, n_{j\downarrow}$ のどちらかが1 (0)

非摂動固有状態

状態：$|0\rangle + |\delta\rangle + |\delta^2\rangle$

エネルギー：$E_0 + \delta E + \delta^2 E$

ハミルトニアン：$\mathcal{H}_0 + \delta\mathcal{H}$

> $\delta\mathcal{H}$は$|0\rangle$に対して対角とする(一般性を失わない)
> このケースでは$\mathcal{H}^{(1)}$は数状態に対して
> 非対角：ホッピングで状態を変える

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 + \delta\hat{\mathcal{H}})(|0\rangle + |\delta\rangle + |\delta^2\rangle) = (E_0 + \delta E + \delta^2 E)(|0\rangle + |\delta\rangle + |\delta^2\rangle)$$

0次 $\quad \hat{\mathcal{H}}_0|0\rangle = E_0|0\rangle$

1次 $\quad \hat{\mathcal{H}}_0|\delta\rangle + \delta\hat{\mathcal{H}}|0\rangle = E_0|\delta\rangle + \delta E|0\rangle$

→左から $\langle 0|$

$$\cancel{E_0\langle 0|\delta\rangle} + \langle 0|\delta\hat{\mathcal{H}}|0\rangle = \cancel{E_0\langle 0|\delta\rangle} + \delta E\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1}$$

$$\delta E = \langle 0|\delta\hat{\mathcal{H}}|0\rangle$$ 非対角なので $\delta E = 0$

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_0)|\delta\rangle = -\delta\hat{\mathcal{H}}|0\rangle$$

2次

$$\hat{\mathcal{H}}_0|\delta^2\rangle + \delta\hat{\mathcal{H}}|\delta\rangle = E_0|\delta^2\rangle + \cancel{\overset{0}{\delta E}|\delta\rangle} + \delta^2 E|0\rangle$$

→左から $\langle 0|$

$$\cancel{E_0\langle 0|\delta^2\rangle} + \langle 0|\delta\hat{\mathcal{H}}|\delta\rangle = \cancel{E_0\langle 0|\delta^2\rangle} + \delta^2 E\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1}$$

$$\delta^2 E = \langle 0|\delta\hat{\mathcal{H}}|\delta\rangle$$

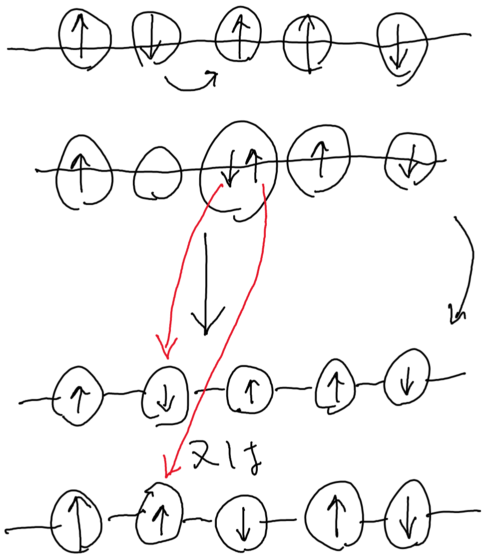
$$= \langle 0 | \{ -\delta\hat{\mathcal{H}} (\hat{\mathcal{H}}_0 - E)^{-1} \delta\hat{\mathcal{H}} \} |0\rangle$$

これを実効的なハミルトニアンと見做す

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = -\underset{(3)}{\delta\hat{\mathcal{H}}} \underset{(2)}{(\mathcal{H}_0 - E_0)^{-1}} \underset{(1)}{\delta\hat{\mathcal{H}}}$$

各サイト一電子ずつ占有した数状態に$\hat{\mathcal{H}}_{eff}$を作用する。

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff}\, c^\dagger_{5\uparrow} c^\dagger_{4\downarrow} c^\dagger_{3\uparrow} c^\dagger_{2\uparrow} c^\dagger_{1\downarrow}|0\rangle$$



$\delta\mathcal{H}\times$: $t_{34} c^\dagger_{3\downarrow} c_{4\downarrow}$

$\leftarrow (\hat{\mathcal{H}}_0 - E_0)^{-1}\times \longrightarrow \frac{1}{U}$ (1サイトのみ二重占有)

$\overset{\shortparallel}{0}$: 一電子ずつ占有なので $n_\uparrow n_\downarrow = 0$

$\delta\mathcal{H}\times$

$-t_{43}\hat{c}^\dagger_{4\downarrow}\hat{c}_{3\downarrow}\frac{1}{U}t_{34}\hat{c}^\dagger_{3\downarrow}\hat{c}_{4\downarrow}$ 同スピンで戻す

$-t_{43}\hat{c}^\dagger_{4\uparrow}\hat{c}_{3\uparrow}\frac{1}{U}t_{34}\hat{c}^\dagger_{3\downarrow}\hat{c}_{4\downarrow}$ スピンいれかえ

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = -\sum_\sigma \sum_{j\neq j'} \frac{|t_{jj'}|^2}{U}\left(c^\dagger_{j'\sigma} c_{j\sigma} c^\dagger_{j\sigma} c_{j'\sigma} + c^\dagger_{j'-\sigma} c_{j-\sigma} c^\dagger_{j\sigma} c_{j'\sigma}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$c^\dagger_{j'\sigma}c_{j'\sigma} - c^\dagger_{j\sigma}c_{j\sigma}c^\dagger_{j'\sigma}c_{j'\sigma}$$

$$\Downarrow$$

$$-c^\dagger_{j\sigma}c_{j-\sigma}c^\dagger_{j'-\sigma}c_{j'\sigma}$$

$$\hat{S}_{jz} = \frac{1}{2}\left(c^\dagger_{j\uparrow}c_{j\uparrow} - c^\dagger_{j\downarrow}c_{j\downarrow}\right) \qquad \underbrace{S^+_j = c^\dagger_{j\uparrow}c_{j\downarrow} \quad S^-_j = c^\dagger_{j\downarrow}c_{j\uparrow}}_{c^\dagger_{j\sigma}c_{j-\sigma} = S^\sigma_j = S_x + i\sigma S_y}$$

$$c^\dagger_{j\sigma}c_{j\sigma} = \frac{\hat{n}_j}{2} + \sigma S_{jz} \qquad \sigma: \begin{cases}\uparrow \to +1\\ \downarrow \to -1\end{cases}$$

$$= \sum_{j\neq j'} \frac{|t_{jj'}|^2}{U}\left\{\left(\frac{\hat{n}_j}{2} + S_{jz}\right)\left(\frac{\hat{n}_{j'}}{2} + S_{j'z}\right) + \left(\frac{\hat{n}_j}{2} - S_{jz}\right)\left(\frac{\hat{n}_{j'}}{2} - S_{j'z}\right)\right.$$

$$\left. + (S_{jx} + iS_{jy})(S_{j'x} - iS_{j'y}) + (S_{jx} - iS_{jy})(S_{j'x} + iS_{j'y})\right\}$$

$$-\sum_{j\neq j'} \frac{t_{jj'}}{U} \hat{n}_{j'}$$ ← 1サイト1電子固定なので定数と見做せる

$$= \sum_{j\neq j'} \frac{|t_{jj'}|^2}{U} \left(2 \cdot S_{jz} S_{j'z} + 2 S_{jx} S_{j'x} + 2 S_{jy} S_{j'y}\right) + \mathrm{const.}$$

$$\mathcal{H}_{eff} = \sum_{jj'} J^{SE}_{jj'} \boldsymbol{S}_j \cdot \boldsymbol{S}_{j'} + \mathrm{const.}$$

$J^{SE}_{jj'} = \dfrac{2|t_{jj'}|^2}{U} > 0$; 超交換相互作用

Half-filled → Mott（モット）絶縁体 → 低温で反強磁性

例) NiO

ただし、前章の鈴森-ハバードモデルでは直接交換積分 $J^{DE}_{jj'}$ が有り、

$$\mathcal{H}_{eff} = \sum_{jj'} \left(J^{SE}_{jj'} - 2J^{DE}_{jj'}\right) \boldsymbol{S}_j \cdot \boldsymbol{S}_{j'} + \mathrm{const.}$$

↑ 強磁性的（スピンをそろえる）
