Hubbardモデルを用いたt-JモデルとHeisenbergモデルの導出

永井佑紀

平成 19 年 8 月 29 日

Hubbard モデルにおいて、ホッピング項が相互作用項より小さいとすれば、t-J モデルや Heisenberg モデルを導くことができる。このノートでは、まず Hubbard モデルのハミルトニアンの相互作用のない場合とホッピング項がない場合の振る舞いを調べ、その後摂動論により t-J モデルや Heisenberg モデルのハミルトニアンを導出する。

1 Hubbard モデルのハミルトニアンと非摂動状態

Hubbard モデルのハミルトニアンは

$$H = H_t + H_U = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + \sum_i U c^\dagger_{i\uparrow} c_{i\uparrow} c^\dagger_{i\downarrow} c_{i\downarrow} \tag{1}$$

と書ける。t_{ij} はホッピングの強さ、U はクーロン相互作用の強さを示している。また、この系は、サイト数を N としたとき一サイトには上向き下向き二つの電子が入りうるので、最大で $2N$ 個の電子を入れることができる。

1.1 相互作用のない系の場合：$U \to 0$ の極限

ホッピング項がどのように対角化されるかを見るため、相互作用のない場合を考える。このとき、ハミルトニアンは

$$H = H_t = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \tag{2}$$

である。ここで、ホッピングは最近接格子点同士で起こるものとし、その強さは $t_{ij} = -t$ と一定であるとする。このハミルトニアンを対角化することを考える。生成消滅演算子 $c^{(\dagger)}_{i\sigma}$ は位置 $\boldsymbol{R}_i$ にスピン σ を持つ粒子を生成消滅させる演算子であり、フーリエ変換すると

$$\begin{aligned} c_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} && (3) \\ c^\dagger_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} && (4) \end{aligned}$$

となる。ここで、$c^{(\dagger)}_{\mathbf{k}\sigma}$ は波数 $\mathbf{k}$ スピン σ を持つ粒子を生成消滅させる演算子である。この表式をハミルトニアンの表式に代入すると

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i,j.\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} \frac{-t}{N} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{R}_j} && (5) \\ &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma} \sum_{i,j} \frac{-t}{N} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{R}_j} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma} \sum_{i,\boldsymbol{\delta}} \frac{-t}{N} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\boldsymbol{R}_i+\boldsymbol{\delta})} && (6) \\ &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma} \frac{-t}{N} \sum_{i,\boldsymbol{\delta}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\boldsymbol{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{\delta}} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma} \frac{-t}{N} \sum_{\boldsymbol{\delta}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{\delta}} && (7) \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} && (8) \end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\epsilon(\mathbf{k}) \quad = \quad \frac{-t}{N}\sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} \tag{9}$$

とおいた。また、$\boldsymbol{\delta}$ の和は最近接格子点での和である。

以上から、相互作用のない系の場合、波数表示を行うことで系を対角化できることがわかる。また、電子数 N_e が偶数の時、基底状態 Φ_{GS} はエネルギーの低い方から順番に詰まった

$$\Phi_{\mathrm{GS}} = \left(\prod_{i=1}^{N_e/2} c^{\dagger}_{\mathbf{k}_i\uparrow} c^{\dagger}_{\mathbf{k}_i\downarrow}\right)\Phi_{\mathrm{vac}} \tag{10}$$

である。ここで、$\mathbf{k}_i$ は離散的なベクトルである[1]。つまり、電子はフェルミ球を作る。

1.2 ホッピングがない系の場合：$t \to 0$ の極限

次に、ホッピングがない系を考える。U は斥力相互作用であるとする ($U > 0$)。この場合、ハミルトニアンは

$$H = H_U = \sum_i U c^{\dagger}_{i\uparrow} c_{i\uparrow} c^{\dagger}_{i\downarrow} c_{i\downarrow} \tag{11}$$

であり、実空間ですでに対角化されている。電子数 N_e がサイト数 N より小さいとき ($N_e < N$)、すべての電子をそれぞれ異なるサイトに割り振ることが可能であり、相互作用項によるエネルギー上昇は最小値であるゼロとなる。よって、上向きスピンの数を $N_\uparrow$、下向きスピンの数を $N_\downarrow$ としたとき（$N_e = N_\uparrow + N_\downarrow$）、基底状態 Φ_{GS} は

$$\Phi_{\mathrm{GS}} = \left(\prod_{i\in X} c^{\dagger}_{i\uparrow}\right)\left(\prod_{i\in Y} c^{\dagger}_{i\downarrow}\right)\Phi_{\mathrm{vac}} \tag{12}$$

と書くことができる。ここで、X、Y は全格子点の集合の部分集合であり、それぞれ上向きおよび下向きの電子が入っている格子点を表している。X は $N_\uparrow$ 個、Y は $N_\downarrow$ 個の格子点を持つ。

1.3 Hubbard モデルの性質

以上から、H_t は波数表示で対角化され波動の性質（遍歴性）を持ち、H_U は実座標表示で対角化され粒子の性質（局在性）を持つことがわかった。つまり、Hubbard モデルは遍歴と局在の競合を起こす模型であることがわかる。

2 スピン演算子と生成消滅演算子の関係：スピン演算子の第二量子化表示

2.1 Heisenberg モデル

Hubbard モデルから Heisenberg モデルを導出する前に、まず、Heisenberg モデルのハミルトニアンが第二量子化表示でどのように表されるかを見る必要がある。

Heisenberg モデルは

$$H_H = \sum_{i,j} J_{ij}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j \tag{13}$$

である。ここで、$\boldsymbol{S}$ とはどのようなものか、電子の生成消滅演算子を用いて書き直すことを考えることにしよう。

[1] 周期境界条件を課すことで $\mathbf{k}$ は離散的になる。

2.2 スピン演算子

第二量子化表示でのスピン演算子は

$$\boldsymbol{S}_i = \frac{1}{2}\sum_{s,s'} c_{is}^\dagger \boldsymbol{\sigma} c_{is'} \tag{14}$$

と書かれる。ここで $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ行列：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma} &= (\sigma_x, \sigma_y.\sigma_z) & (15)\\
\sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & (16)
\end{aligned}$$

である。

さて、そもそもなぜ上式のようにスピン演算子が書けるのか、ということを感覚的に納得するため、演算子 S_z の第二量子化表示について考えてみよう。量子化軸を z 方向にとる。このとき、局所スピン磁化 M_{is} は上向きスピンの数と下向きスピンの数の差であるから、

$$M_{is} = \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \tag{17}$$

と書ける[2]。$n_{i\uparrow}$、$n_{i\downarrow}$ を演算子とみなせば、局所スピン磁化 M_{is} はスピン演算子 S_{iz} の固有値であることがわかる。ゆえに、粒子数演算子を電子の生成消滅演算子で書けば、

$$S_{iz} = \frac{1}{2}(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}) \tag{18}$$

となる。これを σ_z の行列要素 $\sigma_{\alpha\beta}^z$ を用いて表せば

$$\begin{aligned}
S_{iz} &= \frac{1}{2}(c_{i\uparrow}^\dagger \sigma_{\uparrow\uparrow}^z c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger \sigma_{\downarrow\downarrow}^z c_{i\downarrow}) & (19)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{s,s'} c_{is}^\dagger \sigma_{ss'}^z c_{is'} & (20)
\end{aligned}$$

となる。よって、$\boldsymbol{S}_i = (S_{ix}, S_{iy}, S_{iz})$ は式 (41) のように書けるのである。

2.3 生成消滅演算子であらわに書いた Heisenberg モデル

式 (13) を前節のスピン演算子の定義を用いて生成消滅演算子で書き表すことを考える。$\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j = S_{ix}S_{jx} + S_{iy}S_{jy} + S_{iz}S_{jz}$ であるから、それぞれの項を計算すると、

$$\begin{aligned}
S_{ix}S_{jx} &= \frac{1}{4}(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow})(c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}) & (21)\\
&= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} & (22)\\
S_{iy}S_{jy} &= \frac{1}{4}(-ic_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + ic_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow})(-ic_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + ic_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}) & (23)\\
&= -c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} & (24)\\
S_{iz}S_{jz} &= \frac{1}{4}(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow})(c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) & (25)\\
&= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} & (26)
\end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j &= \frac{1}{4}(2c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + 2c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) & (27)\\
&= \frac{1}{4}(2c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + 2c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + n_{i\uparrow}n_{j\uparrow} - n_{i\uparrow}n_{j\downarrow} - n_{i\downarrow}n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}) & (28)
\end{aligned}$$

[2]電子のスピンを考えているのでスピン 1/2 のフェルミオンを考えている。

となる。ここで、$n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ と定義すれば、

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j + \frac{1}{4}n_i n_j &= \frac{1}{4}(2c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\downarrow}c^\dagger_{j\downarrow}c_{j\uparrow} + 2c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\uparrow}c^\dagger_{j\uparrow}c_{j\downarrow} + 2n_{i\uparrow}n_{j\uparrow} + 2n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}) &(29)\\ &= \frac{1}{2}\sum_{s,s'} c^\dagger_{is}c_{is'}c^\dagger_{js'}c_{js} &(30)\end{aligned}$$

とまとめることができる。

3 t-J モデルと Heisenberg モデルのハミルトニアンの導出

ホッピングの強さ t が斥力相互作用 U よりはるかに弱く（$t/U \ll 1$）、電子が一サイトにひとつしか入れない状況（二重占有が禁止された状況）では、Hubbard モデルの有効ハミルトニアンとして t-J モデルのハミルトニアンを用いることができる。さらに、half-filled と呼ばれるサイト数と電子数が一致した状況においては、t-J モデルのハミルトニアンは Heisenberg モデルのハミルトニアンとなる。

導出方法はいくつかある。二次の摂動論を用いる方法や、Schrieffer-Wolff 変換と呼ばれる正準変換を用いる方法[3]等がある。いづれも、$t/U \ll 1$ である状況を用いるという意味では摂動論である。今回は、有効ハミルトニアンの形の見通しがつきやすい Schrieffer-Wolff 変換による方法を用いる。

ここで、Fock 空間を $\mathcal{S}$ と $\mathcal{D}$ という二つの部分空間：

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= [|n_{1\uparrow}, n_{1,\downarrow}, n_{2\uparrow}\cdots\rangle \ :\ \forall i,\ n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \le 1] &(31)\\ \mathcal{D} &= [|n_{1\uparrow}, n_{1,\downarrow}, n_{2\uparrow}\cdots\rangle \ :\ \exists i,\ n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} = 2] &(32)\end{aligned}$$

に分けておくと議論の都合がよい。ここで $\forall i$ は「すべての i で」という意味であり、$\exists i$ は「少なくとも一つの i で」という意味である。つまり、$\mathcal{S}$ はすべてのサイトが無占有か一重占有の状態であり、$\mathcal{D}$ は少なくとも一つのサイトが二重占有状態にある、という空間である。斥力相互作用が非常に強いため二重占有が禁止されているとすると、基底状態は必ず $\mathcal{S}$ の中になければならない。

3.1 Shrieffer-Wolff 変換

まず、Hubbard モデルのハミルトニアンのホッピング項 H_t を以下のように分解する：

$$\begin{aligned}H_t &= H_{t,h} + H_{t,d} + H_{t,mix} &(33)\\ H_{t,h} &= \sum_{i,j,s} t_{ij}(1-n_{i\bar{s}})c^\dagger_{is}c_{js}(1-n_{j\bar{s}}) &(34)\\ H_{t,d} &= \sum_{i,j,s} t_{ij}n_{i\bar{s}}c^\dagger_{is}c_{js}n_{j\bar{s}} &(35)\\ H_{t,mix} &= \sum_{i,j,s} n_{i,\bar{s}}c^\dagger_{is}c_{js}(1-n_{j\bar{s}}) + (1-n_{i\bar{s}})c^\dagger_{is}c_{js}n_{j\bar{s}} &(36)\end{aligned}$$

ここで、$\bar{s}$ は s とは逆向きのスピンであり、s が $\uparrow$ であれば $\bar{s}$ は $\downarrow$ である。H_t はスピン s をもった電子がサイト j からサイト i へと飛び移る様子を表しており、分解後のそれぞれの項は飛び移る際のサイト j とサイト i に逆向きスピン $\bar{s}$ の電子がいるかいないかを区別する。説明を単純化するため、スピン上向きの電子が飛び移る場合を考える。$H_{t,h}$ はサイト i にもサイト j にも下向き電子がいない場合の飛び移りである。この場合は無占有状態が移動していくように見える。これは $\mathcal{S}$ の中でのみ作用できる。$H_{t,d}$ はサイト i にもサイト j にも下向き電子がいる場合の飛び移りである。この場合は二重占有状態が移動していくように見える。これは $\mathcal{D}$ の中でのみ作用できる。$H_{t,mix}$ はサイト i かサイト j のどちらかにひとつ下向き電子がいる場合の飛び移りである。この場合は、二

[3]電子格子相互作用の有効ハミルトニアンを求めた以前のノートで用いた方法である。

重占有が無占有とぶつかって一重占有になるか、一重占有がホールと二重占有に変化するかのどちらかが起きている。これは $\mathcal{D} \to \mathcal{S}$ や $\mathcal{S} \to \mathcal{D}$ という部分空間の混合を表している。

ここで、有効ハミルトニアンの形について考える。もともとのハミルトニアンは

$$H = H_U + H_{t,h} + H_{t,d} + H_{t,mix} \tag{37}$$

である。相互作用が非常に強いためどのサイトも二重占有が禁止されており、基底状態は必ず $\mathcal{S}$ の中に存在する。よって、$\mathcal{D}$ 内でのみ作用できる $H_{t,d}$ は含まれない。また、$\mathcal{S}$ 内で作用できる $H_{t,h}$ は、$\mathcal{D}$ 内のみで作用できる H_U とは無関係であるので、そのまま残しておいてよい。つまり、$\mathcal{S}$-$\mathcal{D}$ 間の混合を引き起こす $H_{t,mix}$ が非摂動項 H_U に対する摂動項として働いている。よって、

$$H = H_0 + H^{(1)} \tag{38}$$

と書いたとき $H_0 = H_U$、$H^{(1)} = H_{t,mix}$ である。また、$H_{t,mix}$ は $\mathcal{S}$ を $\mathcal{D}$ に変える作用があるので、摂動の一次による状態は $\mathcal{D}$ 内にあり基底状態とならず、摂動は二次から効き始めることがわかる。

任意のユニタリー演算子 S を導入した変換：

$$\tilde{H} = e^{-S} H e^{S} = H + [H, S] + \frac{1}{2}[[H, S], S] + \cdots \tag{39}$$

を考える。これは

$$\tilde{H} = H_0 + H^{(1)} + [H_0, S] + [H^{(1)}, S] + \frac{1}{2}[[H_0, S], S] + \cdots \tag{40}$$

と書くことができる。一次摂動を消去するため、演算子 S を

$$H^{(1)} + [H_0, S] = 0 \tag{41}$$

満たすように決めることにする。よって、

$$\tilde{H} = H_0 + \frac{1}{2}[H^{(1)}, S] + O((t/U)^3) \tag{42}$$

となる[4]。ゆえに、有効ハミルトニアンは

$$H_{eff} = H_{t,h} + \tilde{H} = H_{t,h} + H_U + \frac{1}{2}[H_{t,mix}, S] \tag{43}$$

と書ける。

3.2　一般的な形での t-J モデルのハミルトニアン

$H_{int} = [H_{t,mix}, S]/2$ とすると、

$$\begin{aligned}
\langle f|H_{int}|i\rangle &= \frac{1}{2}\langle f|(H_{t,mix}S - SH_{t,mix})|i\rangle && (44)\\
&= \frac{1}{2}\left(\sum_{\alpha}\langle f|H_{t,mix}|\alpha\rangle\langle\alpha|S|i\rangle - \langle f|S|\alpha\rangle\langle\alpha|H_{t,mix})|i\rangle\right) && (45)
\end{aligned}$$

である。ここで、$|f\rangle$、$|i\rangle$ はそれぞれ終状態、始状態であり $\mathcal{S}$ に属す。$|\alpha\rangle$ は中間状態である。$H_{t,mix}$ が部分空間間の遷移を引き起こすので、$|\alpha\rangle$ は $\mathcal{D}$ に属す。関係式 (41) より

$$\begin{aligned}
H_{t,mix} &= SH_U - H_U S && (46)\\
\langle\beta|H_{t,mix}|\gamma\rangle &= \langle\beta|SH_U|\gamma\rangle - \langle\beta|H_U S|\gamma\rangle && (47)\\
\langle\beta|H_{t,mix}|\gamma\rangle &= \langle\beta|S|\gamma\rangle(E_\gamma - E_\beta) && (48)\\
\langle\beta|S|\gamma\rangle &= \frac{\langle\beta|H_{t,mix}|\gamma\rangle}{(E_\gamma - E_\beta)} && (49)
\end{aligned}$$

[4]以前のノート参照。

となる。ここで、$|\beta\rangle$、$|\gamma\rangle$ はお互いに異なる部分空間に属す状態である。また、$E_{\beta(\gamma)}$ は非摂動ハミルトニアン H_U の固有値であり、$H_U|\beta(\gamma)\rangle = E_{\beta(\gamma)}|\beta(\gamma)\rangle$ を満たす。ただし、$|\beta(\gamma)\rangle$ が部分空間 $\mathcal{S}$ 内の状態であるとき、固有値 $E_{\beta(\gamma)}$ はゼロとなる。今回生じる中間状態は $H_{t,mix}$ を一回 $\mathcal{S}$ 内の状態に作用させて生じる状態であるから、二重占有状態が一つある状態である。よって、$|\beta(\gamma)\rangle$ が部分空間 $\mathcal{D}$ 内の状態であるとき、固有値は $E_{\beta(\gamma)} = U$ となる。以上から、式 (45) は

$$\langle f|H_{int}|i\rangle = \frac{1}{2}\left(\sum_{\alpha}\frac{\langle f|H_{t,mix}|\alpha\rangle\langle\alpha|H_{t,mix}|i\rangle}{-U} - \frac{\langle f|H_{t,mix}|\alpha\rangle\langle\alpha|H_{t,mix})|i\rangle}{U}\right) \tag{50}$$

$$= -\frac{\langle f|H_{t,mix}H_{t,mix}|i\rangle}{U} \tag{51}$$

$$H_{int} = \frac{-1}{U}H_{t,mix}H_{t,mix} \tag{52}$$

となる。ここで H_{int} は常に $\mathcal{S}$ 内で作用させるので、部分空間 $\mathcal{S}$ に状態を射影する射影演算子を $P_{\mathcal{S}}$ と定義すれば、

$$H_{int} = \frac{-1}{U}P_{\mathcal{S}}^{\dagger}\left(H_{t,mix}H_{t,mix}\right)P_{\mathcal{S}} \tag{53}$$

$$= \frac{-1}{U}P_{\mathcal{S}}^{\dagger}\left(\sum_{i,j,k,s,s'}t_{ij}t_{jk}c_{is}^{\dagger}c_{js}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{js'}^{\dagger}c_{ks'}\right)P_{\mathcal{S}} \tag{54}$$

となり[5]、有効ハミルトニアンは結局

$$H_{eff} = \left[H_{t,h} - \frac{1}{U}P_{\mathcal{S}}^{\dagger}\left(\sum_{i,j,k,s,s'}t_{ij}t_{jk}c_{is}^{\dagger}c_{js}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{js'}^{\dagger}c_{ks'}\right)P_{\mathcal{S}}\right] \tag{55}$$

$$= P_{\mathcal{S}}^{\dagger}\left[\sum_{i,j,s}t_{ij}c_{is}^{\dagger}c_{js} - \frac{1}{U}\sum_{i,j,k,s,s'}t_{ij}t_{jk}c_{is}^{\dagger}c_{js}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{js'}^{\dagger}c_{ks'}\right]P_{\mathcal{S}} \tag{56}$$

となる[6]。これが、一般的な形での t-J モデルのハミルトニアンである。

3.3 スピン演算子を用いた t-J モデルのハミルトニアン

一般的な形での t-J モデルのハミルトニアン（56）は、スピン演算子を用いた少し見やすい形式に直すことができる。まず、スピンに関する和をあらわに書き表す：

$$\sum_{s,s'}c_{is}^{\dagger}c_{js}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{js'}^{\dagger}c_{ks'} = c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\uparrow}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{j\uparrow}^{\dagger}c_{k\uparrow} + c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\uparrow}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{j\downarrow}^{\dagger}c_{k\downarrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{j\downarrow}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{j\uparrow}^{\dagger}c_{k\uparrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{j\downarrow}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c_{j\downarrow}^{\dagger}c_{k\downarrow} \tag{57}$$

次に、$n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}$ を一番右側へと移動させる。その際、生成消滅演算子の反交換関係：

$$c_{is}^{\dagger}c_{js'} + c_{js'}c_{is}^{\dagger} = \delta_{ij}\delta_{ss'} \tag{58}$$

を用いる。一番右側に $n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}$ がある項は、始状態が $\mathcal{S}$ 内にあるため、ゼロとなる。地道な計算の後、スピンに関する和は

$$c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{k\uparrow}n_{j\downarrow} + c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\uparrow}c_{j\downarrow}^{\dagger}c_{k\downarrow}n_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{j\downarrow}c_{j\uparrow}^{\dagger}c_{k\uparrow}n_{j\downarrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{k\downarrow}n_{j\uparrow} \tag{59}$$

となる。ここで、第二項と第三項を注意深く眺めてみよう。サイト j に関して、第二項は $c_{j\uparrow}c_{j\downarrow}^{\dagger}n_{j\uparrow}$ という演算子を持つ。ここで、$n_{j\uparrow}$ が「始状態にはサイト j に上向きスピンを持つ電子がいる」状態にのみ作用する演算子であり、$c_{j\uparrow}c_{j\downarrow}^{\dagger}$ が「始状態にはサイト j に下向きスピンを持つ電子はおらず、上向きスピンを持つ電子がいる」という

[5] 間にある $n_{j\uparrow}n_{j\downarrow}$ は途中で二重占有状態を経由していることを意味している。
[6] $H_{t,h}$ は部分空間 $\mathcal{S}$ 内で作用するハミルトニアンであるから、射影演算子 $P_{\mathcal{S}}$ の内側に含めることが可能である。

状態にのみ作用する演算子であるので、$c_{j\uparrow}c^\dagger_{j\downarrow}n_{j\uparrow}$ は同じ状態に作用する $c_{j\uparrow}c^\dagger_{j\downarrow}$ と置き換えてもよい。ゆえに、第二項と第三項の一番右端についている $n_{j\uparrow(\downarrow)}$ は消去できることがわかる。以上から、スピンに関する和は

$$c^\dagger_{i\uparrow}c_{k\uparrow}n_{j\downarrow} + c^\dagger_{i\uparrow}c_{j\uparrow}c^\dagger_{j\downarrow}c_{k\downarrow} + c^\dagger_{i\downarrow}c_{j\downarrow}c^\dagger_{j\uparrow}c_{k\uparrow} + c^\dagger_{i\downarrow}c_{k\downarrow}n_{j\uparrow} \tag{60}$$

となり、すべての項を生成消滅演算子４つで表すことができた。次に、式 (28) を

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4}n_in_j &= \frac{1}{4}(2c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\downarrow}c^\dagger_{j\downarrow}c_{j\uparrow} + 2c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\uparrow}c^\dagger_{j\uparrow}c_{j\downarrow} - 2n_{i\uparrow}n_{j\downarrow} - 2n_{i\downarrow}n_{j\uparrow}) && (61)\\
&= \frac{1}{2}(c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\downarrow}c^\dagger_{j\downarrow}c_{j\uparrow} + c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\uparrow}c^\dagger_{j\uparrow}c_{j\downarrow} - c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\uparrow}c^\dagger_{j\downarrow}c_{j\downarrow} - c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\downarrow}c^\dagger_{j\uparrow}c_{j\uparrow}) && (62)\\
&= \frac{1}{2}(-c^\dagger_{i\uparrow}c_{j\uparrow}c^\dagger_{j\downarrow}c_{i\downarrow} - c^\dagger_{i\downarrow}c_{j\downarrow}c^\dagger_{j\uparrow}c_{i\uparrow} - c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\uparrow}c^\dagger_{j\downarrow}c_{j\downarrow} - c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\downarrow}c^\dagger_{j\uparrow}c_{j\uparrow}) && (63)
\end{aligned}$$

と書き換える。そして、有効ハミルトニアンを

$$H_{eff} = P^\dagger_{\mathcal{S}}\left[\sum_{i,j,s}t_{ij}c^\dagger_{is}c_{js} - \frac{1}{U}\sum_{i,j,s,s'}\left(t^2_{ij}c^\dagger_{is}c_{js}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c^\dagger_{js'}c_{is'} + \sum_{k}^{i\neq k}t_{ij}t_{jk}c^\dagger_{is}c_{js}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c^\dagger_{js'}c_{ks'}\right)\right]P_{\mathcal{S}} \tag{64}$$

とあらわし、スピンに関する和を式 (63) を使って書き直せば

$$H_{eff} = P^\dagger_{\mathcal{S}}\left[\sum_{i,j,s}t_{ij}c^\dagger_{is}c_{js} + \sum_{i,j}\frac{1}{2}\left(J_{ij}\left(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4}n_in_j\right) - \frac{1}{U}\sum_{k}^{i\neq k}t_{ij}t_{jk}c^\dagger_{is}c_{js}n_{j\downarrow}n_{j\uparrow}c^\dagger_{js'}c_{ks'}\right)\right]P_{\mathcal{S}} \tag{65}$$

となる。ここで $J_{ij} = 4t^2_{ij}/U$ である。さらに、

$$\boldsymbol{S}_i = \frac{1}{2}\sum_{s,s'}c^\dagger_{is}\boldsymbol{\sigma}_{ss'}c_{is'} \tag{66}$$

を参考にして

$$\frac{1}{2}\sum_{s,s'}c^\dagger_{is}\boldsymbol{\sigma}_{ss'}c_{ks'} \tag{67}$$

というものを用いるとスピン演算子に関する節の議論をほとんどそのまま用いることができて、有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
H_{eff} &= P^\dagger_{\mathcal{S}}(H_t + H^{QHM} + H_J)P_{\mathcal{S}} && (68)\\
H^{QHM} &= \frac{1}{2}\sum_{i,j}J_{ij}\left(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4}n_in_j\right) && (69)\\
H_J &= \sum_{i,j,k}^{i\neq k}\frac{t_{ij}t_{jk}}{2U}\left[c^\dagger_i\boldsymbol{\sigma}c_k\cdot c^\dagger_j\boldsymbol{\sigma}c_j - \sum_s\left(c^\dagger_{is}c_{ks}n_j\right)\right] && (70)
\end{aligned}$$

と書くことができる。

3.4 Heisenberg モデル

式 (68) は t-J モデルのハミルトニアンであり、このハミルトニアンから容易に Heisenberg モデルのハミルトニアンが得られる。つまり、系が Half-filled であるときを考える。このとき、許される状態は部分空間 $\mathcal{S}$ の中でさらに無占有状態が一つもない場合に限られる。このとき、無占有状態の輸送を表す $H_{t,h}$ はハミルトニアンには含まれない。また、式 (68) の第三項の H_J は、$i\neq k$ という条件が課されているが、二次摂動において Half-filled の場合にはサイト k から消えた電子はサイト k に再び戻ってこなければならず、この項もハミルトニアンには含まれない。以上から、二重占有が禁止された Half-filled の Hubbard モデルの有効ハミルトニアンは

$$H_{eff} = H^{\mathrm{QHM}} = \frac{1}{2}\sum_{i,j}J_{ij}\left(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4}n_in_j\right) \tag{71}$$

となる。これはスピン 1/2 の反強磁性 Heisenberg モデルである。つまり、QHM とは Quantum Heisenberg model である。

4 まとめ

以上はすべて基底状態での話であるが、低エネルギーにおいても成り立つことが参考文献等で示されている。つまり、二重占有が禁止された場合の Hubbard モデルの低エネルギーでの有効モデルは t-J モデルであるということである。

参考文献

山田耕作、「電子相関」　岩波講座現代の物理学 16、岩波書店
田崎晴明、「Hubbard 模型の物理と数理」、Web アドレス：http://www.gakushuin.ac.jp/ 881791/
Assa Auerbach, ”Interacting Electrons and Quantum Magnetism”