## 3.4 強結合領域における有効ハミルトニアン：$t-J$ 模型とハイゼンベルグ模型

ハバード模型

$$H = -t\sum_{i,\rho,\sigma} c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho\sigma} + U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \tag{1}$$

$U \gg t$ の場合（強結合領域）を考え

$$H_0 = U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}, \qquad V = \sum_{i,\rho,\sigma} c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho\sigma} \qquad (-t\text{ が摂動パラメータ}) \tag{2}$$

と選ぶ。電子総数を $N_\mathrm{e}$, 格子点総数を $N$ として電子密度

$$n = N_\mathrm{e}/N \le 1$$

の場合を考え，空間 $\phi_0$, $\phi_\eta$ を以下のようにする：

- $\phi_0$：2 重占有のない状態の組（$H_0$ の固有値 $=0$）
- $\phi_\eta$：少なくとも 1 つのサイトが 2 重占有している状態の組（$H_0$ の固有値 $\ge U$）

以下，

$$\Pi_0 H_\mathrm{eff}\Pi_0 = \Pi_0\tilde{H}_0\Pi_0 - \frac{i}{2}t^2\int_0^\infty d\tau e^{-\delta\tau}[\Pi_0 V(\tau)\Pi_\eta V\Pi_0 - \Pi_0 V\Pi_\eta V(\tau)\Pi_0] \tag{3}$$

を具体的に計算していく。

まず，$\Pi_0\tilde{H}_0\Pi_0$ は

$$\Pi_0\tilde{H}_0\Pi_0 = \underbrace{\Pi_0 H_0\Pi_0}_{=0} - t\Pi_0 V\Pi_0 = -t\sum_{i,\rho,\sigma}\Pi_0 c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho\sigma}\Pi_0 \quad \leftarrow \text{電子のないサイトを探してのホッピング} \tag{4}$$

次に，(3) の右辺第 2 項を考える。

$$V(\tau) = \sum_{i,\rho,\sigma} c^\dagger_{i\sigma}(\tau)c_{i+\rho\sigma}(\tau) \tag{5}$$

において

$$c^\dagger_{i\sigma}(\tau) = e^{iH_0\tau}c^\dagger_{i\sigma}e^{-iH_0\tau} = e^{i\tau U n_{i,-\sigma}}c^\dagger_{i\sigma}, \qquad c_{i+\rho\sigma}(\tau) = c_{i+\rho\sigma}e^{-i\tau U n_{i+\rho,-\sigma}} \quad \leftarrow \text{導出は問 1} \tag{6}$$

を用いて

$$V(\tau) = \sum_{i,\rho,\sigma} e^{-i\tau U(n_{i+\rho,-\sigma}-n_{i,-\sigma})}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho\sigma} \tag{7}$$

これを積分して

$$\begin{aligned} i\int_0^\infty d\tau\, e^{-\delta\tau}V(\tau) &= i\sum_{i,\rho,\sigma}\int_0^\infty d\tau\, e^{-\delta\tau}e^{-i\tau U(n_{i+\rho,-\sigma}-n_{i,-\sigma})}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho\sigma} \\ &= \sum_{i,\rho,\sigma}\frac{1}{U(n_{i+\rho,-\sigma}-n_{i,-\sigma})-i\delta}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho\sigma} \end{aligned} \tag{8}$$

(8) を用いて (3) の右辺第 2 項を求める。まず，$\Pi_0 V(\tau)\Pi_\eta V\Pi_0$ を含む部分

$$i\int_0^\infty d\tau e^{-\delta\tau}\Pi_0 V(\tau)\Pi_\eta V\Pi_0 = \sum_{i',\rho',\sigma'}\sum_{i,\rho,\sigma}\Pi_0\frac{1}{U(n_{i'+\rho',-\sigma'}-n_{i',-\sigma'})-i\delta}c^\dagger_{i'\sigma'}c_{i'+\rho',\sigma'}\Pi_\eta c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho,\sigma}\Pi_0 \tag{9}$$

を考える。可能な過程は $c^\dagger_{i\sigma}$ で 2 重占有を作って $\phi_\eta$ に移り，$c_{i'+\rho',\sigma'}$ で 2 重占有を解消して $\phi_0$ に戻るものである。このことを考慮すると

$$c_{i'+\rho',\sigma'}\Pi_\eta \to \delta_{i'+\rho',i}c_{i,\sigma'}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

として良いので

$$i\int_0^\infty d\tau e^{-\delta\tau}\Pi_0 V(\tau)\Pi_\eta V\Pi_0=\sum_{\rho',\sigma'}\sum_{i,\rho,\sigma}\Pi_0\frac{1}{U(n_{i,-\sigma'}-n_{i-\rho',-\sigma'})-i\delta}c^\dagger_{i-\rho'\sigma'}c_{i,\sigma'}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho,\sigma}\Pi_0 \tag{10}$$

$i$ サイトの 2 重占有が $c_{i,\sigma'}$ で解消され，$c^\dagger_{i-\rho'\sigma'}$ では 2 重占有を作ってはいけないことから

$$n_{i-\rho',-\sigma'}\to 0,\qquad n_{i,-\sigma'}\to 1$$

として良い。またこのとき，$-i\delta$ は落とせるので，結局

$$i\int_0^\infty d\tau e^{-\delta\tau}\Pi_0 V(\tau)\Pi_\eta V\Pi_0=\frac{1}{U}\sum_{\rho',\sigma'}\sum_{i,\rho,\sigma}\Pi_0 c^\dagger_{i+\rho'\sigma'}c_{i,\sigma'}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho,\sigma}\Pi_0 \tag{11}$$

を得る（最後に和中で $-\rho'\to\rho'$ とした）。(3) の右辺第 2 項の $\Pi_0 V\Pi_\eta V(\tau)\Pi_0$ を含む部分も同様に評価すると

$$i\int_0^\infty d\tau e^{-\delta\tau}[\Pi_0 V(\tau)\Pi_\eta V\Pi_0-\Pi_0 V\Pi_\eta V(\tau)\Pi_0]=\frac{2}{U}\sum_{i,\rho,\rho'}\sum_{\sigma,\sigma'}\Pi_0 c^\dagger_{i+\rho'\sigma'}c_{i,\sigma'}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho,\sigma}\Pi_0 \tag{12}$$

が得られる。(12) の右辺の和中の演算子を

$$I_{i,\rho,\rho'}\equiv\sum_{\sigma,\sigma'}\Pi_0 c^\dagger_{i+\rho'\sigma'}c_{i,\sigma'}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho,\sigma}\Pi_0$$

とおく。$\rho=\rho'$ の項 $I_{i,\rho=\rho'}$ は 2 つのサイト $i$, $i+\rho$ が関与する相互作用で，交換相互作用を与える。それを見るため，演算子 $\tilde{\boldsymbol{S}}_i$ を

$$\tilde{\boldsymbol{S}}_i=\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}c^\dagger_{i\sigma}[\boldsymbol{\sigma}]_{\sigma,\sigma'}c_{i\sigma'}\quad(\boldsymbol{\sigma}\text{ はパウリ行列を }x,y,z\text{ 成分とするベクトル}) \tag{13}$$

で導入する。(13) より

$$\tilde{S}^+_i=c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\downarrow},\quad \tilde{S}^-_i=c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\uparrow},\quad \tilde{S}^z_i=\frac{1}{2}(c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\uparrow}-c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\downarrow})$$

であり，$\tilde{\boldsymbol{S}}_i$ はサイト $i$ の電子数が 1 個の場合はスピン 1/2 演算子となり，0,2 個の場合はスピン 0 演算子となる（問 2)。演算子 $\tilde{\boldsymbol{S}}_i$ を用いると，$I_{i,\rho=\rho'}$ は

$$I_{i,\rho=\rho'}=-2\Pi_0\left(\tilde{\boldsymbol{S}}_i\cdot\tilde{\boldsymbol{S}}_{i+\rho}-\frac{1}{4}n_i n_{i+\rho}\right)\Pi_0\quad\leftarrow\text{ 交換相互作用（導出は問 3）} \tag{14}$$

と書ける。次に，$\rho\neq\rho'$ の項

$$I_{i,\rho\neq\rho'}=\sum_{\sigma,\sigma'}\Pi_0 c^\dagger_{i+\rho'\sigma'}c_{i,\sigma'}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}c^\dagger_{i\sigma}c_{i+\rho,\sigma}\Pi_0\quad\leftarrow\text{ 3-site hopping} \tag{15}$$

は，3 つのサイト $i, i+\rho, i+\rho'$ が関与する。サイト $i+\rho$ の電子が 1 回ホップしてサイト $i$ に 2 重占有を作り，更に，サイト $i+\rho'$ が空サイトであればそこへホップするというものである（3-site hopping)。なお，half-filling ではサイト $i+\rho'$ が空サイトとなっていることはないので，3-site hopping は生じない。

以上より

$$\Pi_0 H^{\rm eff}\Pi_0=\Pi_0 H^{t-J}\Pi_0 \tag{16}$$

$$H^{t-J}=-t\sum_{\langle i,j\rangle\sigma}(c^\dagger_{i\sigma}c_{j\sigma}+\text{h.c.})+J\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\tilde{\boldsymbol{S}}_i\cdot\tilde{\boldsymbol{S}}_j-\frac{1}{4}n_i n_j\right)+[\text{3-site hopping}] \tag{17}$$

ただし

$$J=\frac{4t^2}{U} \tag{18}$$

half-filling（電子密度 $n=1$）では，hopping, 3-site hopping は起こることはなく，また，$n_i n_j=1$ なのでハイゼンベルグ模型に帰着する：

$$\Pi_0 H^{t-J}\Pi_0\big|_{n=1}=J\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j-\frac{1}{4}\right) \tag{19}$$

ここで，$\boldsymbol{S}_i$ はスピン 1/2 演算子である。

## スピン軌道相互作用の影響

スピン軌道相互作用を含むハバード模型

$$H = \underbrace{\sum_{i,j}\sum_{\alpha,\beta} c_{i,\alpha}^{\dagger} h_{ij,\alpha\beta} c_{j,\beta}}_{=H'} + \underbrace{U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}}_{=H_0} \qquad (h_{jj',\alpha\alpha'} = t_{j,j'}\delta_{\alpha,\alpha'} + i\boldsymbol{v}_{j,j'}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha,\alpha'}) \tag{20}$$

で，half-filled の場合を考える。強結合有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= -\frac{i}{2}\int_0^{\infty} d\tau e^{-\delta\tau}\left[\Pi_0 H'(\tau)\Pi_\eta H'\Pi_0 - \Pi_0 H'\Pi_\eta H'(\tau)\Pi_0\right] \\
&= -\frac{1}{U}\sum_{ij}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \Pi_0 c_{j,\alpha'}^{\dagger}(t_{ij}\delta_{\alpha'\beta'} - i\boldsymbol{v}_{ij}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\beta'})c_{i,\beta'}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}c_{i,\alpha}^{\dagger}(t_{ij}\delta_{\alpha\beta} + i\boldsymbol{v}_{ij}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta})c_{j,\beta}\Pi_0 \\
&= -\frac{1}{U}\sum_{ij} t_{ij}^2 \sum_{\alpha\alpha'} \Pi_0 c_{j,\alpha'}^{\dagger} c_{i,\alpha'} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{j,\alpha}\Pi_0 \\
&\quad -\frac{1}{U}\sum_{ij} t_{ij}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} i\boldsymbol{v}_{ij}\cdot(\delta_{\alpha'\beta'}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\beta'})\Pi_0 c_{j,\alpha'}^{\dagger} c_{i,\beta'} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{j,\beta}\Pi_0 \\
&\quad -\frac{1}{U}\sum_{ij}\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} (\boldsymbol{v}_{ij}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\beta'})(\boldsymbol{v}_{ij}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta})\Pi_0 c_{j,\alpha'}^{\dagger} c_{i,\beta'} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{j,\beta}\Pi_0
\end{aligned} \tag{21}$$

ここで

$$\sum_{\alpha\alpha'} \Pi_0 c_{j,\alpha'}^{\dagger} c_{i,\alpha'} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{j,\alpha}\Pi_0 = -2\left(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4}\right) \tag{22}$$

$$\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} i\boldsymbol{v}_{ij}\cdot(\delta_{\alpha'\beta'}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\beta'})\Pi_0 c_{j,\alpha'}^{\dagger} c_{i,\beta'} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{j,\beta}\Pi_0 = -4\boldsymbol{v}_{ij}\cdot(\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_j) \quad \leftarrow \text{問 } 4 \tag{23}$$

$$\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} (\boldsymbol{v}_{ij}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\beta'})(\boldsymbol{v}_{ij}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta})\Pi_0 c_{j,\alpha'}^{\dagger} c_{i,\beta'} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{j,\beta}\Pi_0 = \frac{2}{3}\boldsymbol{v}_{ij}^2\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - \sum_{a,b=x,y,z} 4\left(v_{ij}^a v_{ij}^b - \delta_{ab}\frac{\boldsymbol{v}_{ij}^2}{3}\right)S_i^a S_j^b \tag{24}$$

(22)–(24) を (21) に代入し，定数項を略すと

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= \sum_{ij}\left[\frac{2(t_{ij}^2 - \frac{\boldsymbol{v}_{ij}^2}{3})}{U}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j + \frac{4t_{ij}}{U}\boldsymbol{v}_{ij}\cdot(\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_j) + \frac{4}{U}\sum_{a,b=x,y,x} S_i^a\left(v_{ij}^a v_{ij}^b - \delta_{ab}\frac{\boldsymbol{v}_{ij}^2}{3}\right)S_j^b\right] \\
&= \sum_{\langle ij\rangle}\left[J_{ij}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j + \boldsymbol{D}_{ij}\cdot(\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_j) + \sum_{a,b=x,y,x} S_i^a\Gamma_{ij}^{ab}S_j^b\right]
\end{aligned} \tag{25}$$

ただし

$$J_{ij} = \frac{4}{U}\left(t_{ij}^2 - \frac{\boldsymbol{v}_{ij}^2}{3}\right), \quad \boldsymbol{D}_{ij} = \frac{8}{U}t_{ij}\boldsymbol{v}_{ij}, \quad \Gamma_{ij}^{ab} = \frac{8}{U}\left(v_{ij}^a v_{ij}^b - \delta_{ab}\frac{\boldsymbol{v}_{ij}^2}{3}\right) \tag{26}$$

は超交換相互作用，$\boldsymbol{D}$ ベクトル，異方的交換相互作用である。

[課題]

**問 1.** (6) の第一式を導出せよ。

**問 2.** (13) で定義された $\tilde{S}_i^+$, $\tilde{S}_i^-$, $\tilde{S}_i^z$ の表現行列（$4\times 4$ 行列）を求めよ。

**問 3.** (14) を導出する。簡単のため

$$I_{i,j} \equiv \sum_{\sigma,\sigma'} \Pi_0 c_{i,\sigma'}^\dagger c_{j,\sigma'} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \Pi_0$$

とおく。$\sigma'$ を和を書き出して

$$\begin{aligned} I_{i,j} &= \sum_\sigma \Pi_0 c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \Pi_0 + \sum_\sigma \Pi_0 c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \Pi_0 \\ &= \sum_\sigma \Pi_0 c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \Pi_0 + \sum_\sigma \Pi_0 c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} n_{j,-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \Pi_0 \end{aligned}$$

(i) 次式を示せ：

$$\sum_\sigma \Pi_0 c_{i,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \Pi_0 = -2\Pi_0 (\tilde{S}_i^x \tilde{S}_j^x + \tilde{S}_i^y \tilde{S}_j^y) \Pi_0$$

(ii) 次式を示せ：

$$\sum_\sigma \Pi_0 c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} n_{j,-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \Pi_0 = -2\Pi_0 \left( \tilde{S}_i^z \tilde{S}_j^z - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \Pi_0$$

**問 4.** (23) の左辺を

$$\sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} i\boldsymbol{v}_{ij} \cdot (\delta_{\alpha'\beta'} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\beta'}) \Pi_0 c_{j,\alpha'}^\dagger c_{i,\beta'} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta} \Pi_0 = \sum_{a=x,y,x} A^a$$

とおく。ここで

$$A^a = i v_{ij}^a \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} (\delta_{\alpha'\beta'} \sigma^a{}_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta} \sigma^a{}_{\alpha'\beta'}) \Pi_0 c_{j,\alpha'}^\dagger c_{i,\beta'} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta} \Pi_0$$

である。$\sigma_{\alpha\beta}^z = (-1)^\alpha \delta_{\beta,\alpha}$ を用い，$A^z$ が

$$A^z = -4 v_{ij}^z (S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x)$$

と書けることを示せ。