

4.2 Some Ground State Theorems

Nagaoka's Theorem 4.1

proof

Lieb's Theorem 4.2

Corollary 4.3

Lieb's Theorem 4.4

Hubbard 模型的总自旋与总磁化强度遵循某些一般的定理，下面将不加详细证明地给出这些定理。下面所有的定理都限制在有限晶格尺寸 \mathcal{N} 与固定电子数 N_e 的情形。

Nagaoka's Theorem 4.1

二分晶格 (bipartite lattice) 是指晶格能分成两套子晶格 $A \cdot B$ ，相互作用只存在于两套晶格间，即对 $t_{ij}, i \in A, j \in B$ ，或 $i \in B, j \in A$ 。

二分晶格无穷大 U 模型的基态：

$$\lim_{U \rightarrow \infty} \mathcal{H}^{eff} = - \sum_{ijs} |t_{ij}| P_s c_{is}^\dagger c_{js} P_s \quad (4.28)$$

当 $N_e = \mathcal{N} - 1$ ，为完全极化的铁磁体，总自旋为：

$$S = \frac{1}{2}(\mathcal{N} - 1) \quad (4.29)$$

其中一个具有最大磁化强度（未归一化的）基态为

$$\Psi^\dagger = \sum_i (-1)^i \prod_{i' \neq i} c_{i'\uparrow}^\dagger |0\rangle \quad (4.30)$$

基态能量为 $-zt$ ，其中 z 为最近邻格点数，总自旋由 (4.29) 式给出。

proof



Nagaoka Y. Ferromagnetism in a narrow, almost half-filled s band[J].
Physical Review, 1966, 147(1): 392.

$$H = \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + I \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$
$$n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$$

假设：

1. 几乎半填充：

$$|n| \ll N$$
$$n = N - N_e$$

N_e, N 分别为电子数与原子数

2. 仅考虑最近邻，各向同性跃迁

$$t_{ij} = t < 0$$

3. 带隙与排斥势相比很小：

$$|t| \ll I$$

4. 晶体结构为简单立方（sc），体心立方（bcc），面心立方（fcc）或密排六方（hcp）

2, 4 在一些讨论中是不必要的

两种情况：

1. sc, bcc ; $N_e > N$ 的 fcc, hcp

考虑空穴，可将情况转化为 $N_e < N$, $t \rightarrow -t$

2. $N_e < N$ 的 fcc, hcp

结论：

1. 对第一种情况， $n = 1, I = \infty$

具有最大总自旋的铁磁态是系统的基态

2. 对第二种情况， $n = 1, I = \infty$

具有最大总自旋的铁磁态不是系统的基态

3. 对第一种情况，有限 n, I

若

$$\frac{\alpha n}{N} < \frac{t}{I}$$

铁磁态不是系统的基态。 α 为依赖晶格结构的常数

结论 1 的证明：

Hamiltonian 为：

$$H' = t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$$

此时的 Hilbert 空间由下面的态张成：

$$\Psi_{i\alpha_i} = (-1)^i c_{1\sigma_1}^{\dagger} c_{2\sigma_2}^{\dagger} \cdots c_{i-1\sigma_{i-1}}^{\dagger} c_{i+1\sigma_{i+1}}^{\dagger} \cdots c_{N\sigma_N}^{\dagger} |0\rangle$$

i 表示第 i 个位点不填充电子（空穴）， α_i 表示自旋构型

$(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}, \cdots, \sigma_N)$

记自旋向上的电子数为 N_{\uparrow} ，自旋向下的电子数为 N_{\downarrow}

- 对于铁磁态（ $N_{\uparrow} = N_e, N_{\downarrow} = 0$ 或 $N_{\uparrow} = 0, N_{\downarrow} = N_e$ ），其能量最低的态满足：

$$S = S_{\max} = \frac{1}{2} N_e, \quad S = \pm S$$

$$E = -zt$$

其中 z 为最近邻格点数

通过两步证明：

1. 不存在能量 $E < -zt$ 的态
2. 不存在能量 $E = -zt$ ，且自旋 $S < S_{max}$ 的态

- 引入超晶格的记号 $\{(i\alpha_i)\}$

在超晶格中， $(i\alpha_i)$ 表示格点， $(i\alpha_i), (i\beta_i)$ 称为近邻，若 $\langle \Psi_{i\alpha_i} | H' | \Psi_{j\beta_j} \rangle \neq 0$

因此：

$$\langle \Psi_{i\alpha_i} | H' | \Psi_{j\beta_j} \rangle = \begin{cases} -t & \text{for } (j\beta_j) = n[(i\alpha_i)] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

其中 $n[(i\alpha_i)]$ 表示 $(i\alpha_i)$ 的近邻格点。

- 引入格林函数：

$$(j\beta_j | i\alpha_i)_\omega = \left\langle \Psi_{j\beta_j} \left| \frac{1}{\omega - H'} \right| \Psi_{i\alpha_i} \right\rangle$$

ω 为复数。 $(i\alpha_i | i\alpha_i)_\omega$ 极点的实部对应能量本征值。简单起见，下面仅考虑 $(j\beta_j | i\alpha_i)_\omega$ 为实数。

证明不存在能量 $E < -zt$ 的态（通过z证明没有小于 $-zt$ 的极点）

利用展开

$$\frac{1}{\omega - H'} = \frac{1}{\omega} \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\frac{H'}{\omega} \right)^n$$

有

$$\omega(j\beta_j | i\alpha_i)_\omega = \langle \Psi_{j\beta_j} | \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\frac{H'}{\omega} \right)^n | \Psi_{i\alpha_i} \rangle$$

由于 $\{\Psi_{j\beta_j}\}$ 为正交基，因此只有跃迁到 $(j\beta_j)$ 才有非零贡献。

考虑 $(i\alpha_i | i\alpha_i)_\omega$ ，则只有跃迁回起点的过程才有贡献。设 N_p 为 p 次跃迁后回到起点的路径的个数， A_p 为不经过起点（不交叉）经过 p 次跃迁而回到起点 $i\alpha_i$ 的路径个数。

则：

$$\omega(i\alpha_i|i\alpha_i)_\omega = 1 + \sum_{n=2}^{+\infty} N_p \left(\frac{-t}{\omega}\right)^n = 1 + F(\omega)$$

$$F(\omega) = \sum_{n=2}^{+\infty} N_p \left(\frac{-t}{\omega}\right)^n$$

$F(\omega)$ 含有交叉路径的项，将其完全分解为不交叉路径项有：

$$F(\omega) = f(\omega)(1 + F(\omega)) \implies F(\omega) = \frac{f(\omega)}{1 - f(\omega)}$$

$$f(\omega) = \sum_{n=2}^{+\infty} A_p \left(\frac{-t}{\omega}\right)^n = \sum_{p=2}^{\infty} \frac{A_p}{z^p} \left(\frac{-zt}{\omega}\right)^p$$

从而：

$$(i\alpha_i|i\alpha_i)_\omega^{-1} = \omega[1 - f(\omega)]$$

z^p 为 $(i\alpha_i)$ 无任何限制下跃迁 p 次的路径数，从而：

$$A_p < z^p$$

因此， $f(\omega)$ 在 $\omega < -zt$ 时绝对收敛。

考虑铁磁的情况， $N_\uparrow = N_e, N_\downarrow = 0$,

$$(i|i)_\omega^{-1} = \omega[1 - f_0(\omega)]$$

$$f_0(\omega) = \sum_{p=2}^{\infty} (A_p^0/z^p) (-zt/\omega)^p,$$

此时由于自旋构型唯一，超晶格格点与实空间格点是等价的。考虑到铁磁态最低能量为 $E = -zt$ ，从而上式无小于 $-zt$ 的极点，因此

$$f_0(\omega) \neq 1 \quad \text{for} \quad \omega < -zt.$$

考虑一般情况，引入：

$$v_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_{p=2}^{+\infty} (C_p^{\alpha\beta} / z^p) (-zt/\omega)^p$$

其中 $C_p^{\alpha\beta}$ 为从 $(i\alpha_i)$ 到 $(i\beta_i)$ 不交叉（不经过 i ）的路径数。 $v_{\alpha\beta}$ 具有以下性质：

$$1. \quad v_{\alpha\beta}(\omega) > 0, \quad \text{for } \omega < -zt$$

显然

$$2. \quad \sum_{\beta} v_{\alpha\beta}(\omega) = f_0(\omega)$$

考虑 $\sum_{\beta} C_p^{\alpha\beta}$ ，包含了所有 p 次跃迁后回到起点的不交叉路径数，对末态自旋构型没有要求，这与铁磁态 p 次跃迁后回到起点不交叉路径数是相同的，因为铁磁态的自旋构型固定，只要跃迁回起点对应的超晶格格点就相同。从而

$$\sum_{\beta} C_p^{\alpha\beta} = A_p^0$$

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} v_{\alpha\beta}(\omega) &= \sum_{\beta} \sum_{p=2}^{+\infty} (C_p^{\alpha\beta} / z^p) (-zt/\omega)^p \\ &= \sum_{p=2}^{+\infty} \left(\sum_{\beta} C_p^{\alpha\beta} / z^p \right) (-zt/\omega)^p \\ &= \sum_{p=2}^{+\infty} (A_p^0 / z^p) (-zt/\omega)^p \\ &= f_0(\omega) \end{aligned}$$

利用 $v_{\alpha\beta}(\omega)$ 可将 $f(\omega)$ 改写为

$$f(\omega) = v_{\alpha\alpha}(\omega) + \sum_{\beta(\neq\alpha)} v_{\alpha\beta}(\omega)v_{\beta\alpha}(\omega) \\ + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \sum_{\gamma(\neq\alpha)} v_{\alpha\beta}(\omega)v_{\beta\gamma}(\omega)v_{\gamma\alpha}(\omega) + \dots$$

$f(\omega)$ 要求跃迁不经过 $(i\alpha_i)$, 而 $v_{\alpha\beta}(\omega)$ 要求跃迁不经过 i 点 (即 $(i\gamma_i), \forall \gamma_i$)

利用 $v_{\alpha\beta}$ 的性质逐项凑出 $f_0(\omega)$:

$$f(\omega) = f_0(\omega) + \sum_{\beta(\neq\alpha)} v_{\alpha\beta}(\omega) [v_{\beta\alpha}(\omega) - 1] + \dots \\ = f_0(\omega) + [f_0(\omega) - 1] \sum_{\beta(\neq\alpha)} v_{\alpha\beta}(\omega) \\ + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \sum_{\gamma(\neq\alpha)} v_{\alpha\beta}(\omega)v_{\beta\gamma}(\omega) [v_{\gamma\alpha}(\omega) - 1] + \dots$$

最终有 :

$$f(\omega) - 1 = [f_0(\omega) - 1] \left[\sum_{\beta(\neq\alpha)} v_{\alpha\beta}(\omega) \sum_{\beta(\neq\alpha)} \sum_{\gamma(\neq\alpha)} v_{\alpha\beta}(\omega)v_{\beta\gamma}(\omega) + \dots \right]$$

对于 $w < -zt$, 利用 $v_{\alpha\beta}$ 的性质, 第二个括号内的项大于0, 从而有 :

$$f(\omega) \neq 1, \quad \text{for } w < -zt$$

因此, 基态的能量 $E = -zt$ 。

证明不存在能量 $E = -zt$, $S < S_{max}$ 的态

超晶格的连通性 :

1. (a) 构型可通过最近邻跃迁转变为
(b) 构型—— (a)、(b) 连通
2. (a)、(b) 构型无法通过最近邻跃迁转变为 (c) 构型—— (a)、(b)

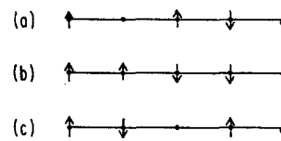


FIG. 1. Some examples of the configuration of spins in the one-dimensional lattice with $N=5$ and $N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=2$.

与 (c) 不连通

对一维情形，超晶格能被分为若干不连通的部分，但对于二维或三维，则会有很大的不同。下面的证明依赖于所有超晶格格点连通的情况。

记能量为 $-zt$ ，任意 $N_{\uparrow}, N_{\downarrow}$ 的态为 Ψ

$$\Psi = \sum_{(i\alpha_i)} \Gamma(i\alpha_i) \Psi_{i\alpha_i}.$$

从 $H'\Psi = -zt\Psi$ 出发

$$\begin{aligned} H' \sum_{(i\alpha_i)} \Gamma(i\alpha_i) \Psi_{i\alpha_i} &= -zt \sum_{(i\alpha_i)} \Gamma(i\alpha_i) \Psi_{i\alpha_i} \\ -t \sum_{(i\alpha_i)} \Gamma(i\alpha_i) \sum_{j\beta_j=n[(i\alpha_i)]} \Psi_{j\beta_j} &= -zt \sum_{(i\alpha_i)} \Gamma(i\alpha_i) \Psi_{i\alpha_i} \\ \sum_{(i\alpha_i)} \Gamma(i\alpha_i) \sum_{j\beta_j=n[(i\alpha_i)]} \Psi_{j\beta_j} &= z \sum_{(i\alpha_i)} \Gamma(i\alpha_i) \Psi_{i\alpha_i} \end{aligned}$$

两边同时与 $\Psi_{i\alpha_i}$ 内积，利用 $\{\Psi_{j\beta_j}\}$ 正交归一有：

$$\Gamma(i\alpha_i) = z^{-1} \sum_{(j\beta_j)=n[(i\alpha_i)]} \Gamma(j\beta_j)$$

上式是一种离散形式的 Laplace 方程。上式表明某一个基的组合系数等于最近邻基的组合系数的平均值，因而 $\Gamma(i\alpha_i)$ 无极值，从而

$$\Gamma(i\alpha_i) = \text{constant}$$

因此， $E = -zt$ 对应的态唯一。

它通过对空穴的所有闭合跳跃路径求和来构建几种类型的晶格的单粒子格林函数。作为一个直接的推论，定理4.1通过粒子-空穴变换，可推广至二分晶格半填充+1个电子的情形：

$$c_{is} \rightarrow \eta_i c_{is}^\dagger, \quad \eta_i = \begin{cases} 1 & i \in A \\ -1 & i \in B \end{cases} \quad (4.31)$$

粒子-空穴变换保持 (4.28) 不变，并使 $N_e \rightarrow \mathcal{N} + 1$ 。

Nagaoka 铁磁性完全源自动能：在完全对齐的自旋构型中最小化空穴动能导出。对于任意的自旋构型，跃迁的空穴跳会留下一串平移的自旋。因此，大量闭合路径不会将自旋恢复至初始构型，因此从动能中排除 (Fig. 4.2)。另一方面，铁磁自旋构型可通过任意闭合路径恢复至初态，因此其动能是最小的。

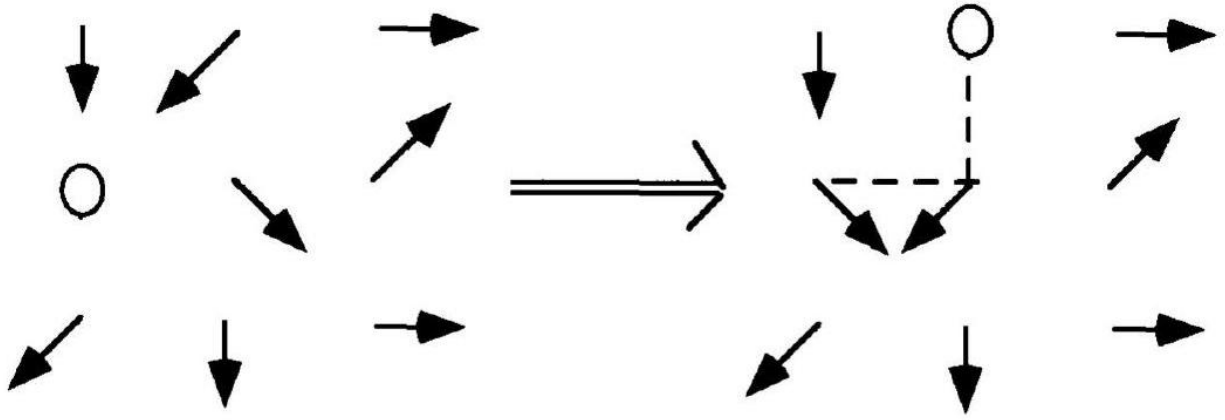


FIGURE 4.2. Two hops of a hole in a spin background.

然而，这个结论不能简单地推广值有限 U 或其他空穴密度的情况。Nagaoka Hamiltonian (4.28) 的激发谱存在问题：在 $N_e = \mathcal{N}$ 时，对 \mathcal{N} 个独立的半自旋，基态存在 $2^{\mathcal{N}}$ 简并。这种简并性受到大多数偏离定理严格条件的强烈影响，比如：有限温度、有限 U 或不同的填充。因此 Nagaoka 铁磁体在何种微扰下存在还远不清楚。从定理得到的主要内容就是移动的空穴倾向于让背景自旋在一定范围或时间尺度上规则排列。这表明 $t - J$ 模型中，局域的铁磁极子可在空穴周围形成 (see Chapter 19)。

Lieb's Theorem 4.2

考虑二分晶格正 U Hubbard 模型：

$$\mathcal{H} = - \sum_{sij} t_{ij} c_{is}^\dagger c_{js} + \sum_i |U_i| n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.32)$$

$\mathcal{N}_A, \mathcal{N}_B$ 分别为子晶格 A, B 格点数的。设电子数为 $N_e = \mathcal{N}_A + \mathcal{N}_B$ (半填充)，基态 $|\Psi_0\rangle$ 有总自旋

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2 |\Psi_0\rangle &= S(S+1) |\Psi_0\rangle \\ S &= \frac{1}{2} |\mathcal{N}_A - \mathcal{N}_B| \end{aligned} \quad (4.33)$$

$|\Psi_0\rangle$ 有 $2S + 1$ 自旋翻转简并。

Corollary 4.3

对于 $\mathcal{N}_A = \mathcal{N}_B$ 的二分晶格，基态是完全单态且无简并的。因此在有限 U 下不能有任何能级交叉（对于基态）。

换句话说，小 U 和大 U 在半填充下的基态是“绝热连接”，即随着 U 的增大，基态连续地从自由电子气演化至 Heisenberg 反铁磁态（Section 3.2）。Chapter 5 讲述了 Heisenberg 模型的 Marshall's theorem，该定理与 Lieb's Theorem 4.2 非常相似。这两个定理都利用了 Hamiltonian 特殊的性质：非对角元在某个基下是非正的。

在 Section 3.3 中 我们看到全满的负 U Hubbard 模型可以转化为半满正 U Hubbard 模型。因此定理4.2 与下面的定理密切相关

Lieb's Theorem 4.4

考虑有限格点($\mathcal{N} < \infty$)的负 U Hubbard 模型

$$\mathcal{H} = - \sum_{sij} t_{ij} c_{is}^\dagger c_{js} - \sum_i |U_i| n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.34)$$

对于满足 $t_{ij} = t_{ji}$ 的任意跃迁系数的偶数电子。_(4.34)_的基态 $|\Psi_0\rangle$ 是对总自旋 $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i$ 是单态的

$$\mathbf{S}_{\text{tot}}^2 |\Psi_0\rangle = 0 \quad (4.35)$$

另外，基态是唯一的。

对于 $|U/t| \gg 1$ 定理的结论并不让人意外，因为此时基态在局域上电子是自旋配对的。定理 4.4 的结论在 $|U/t|$ 较小时是非平凡的。如在 Section 3.3所讨论的，负 U Hamiltonian 描述了电荷密度序与超导的竞争。不幸的是，基态的自旋并不能帮助我们区分在热力学极限下可能的对称破缺。 这些必须通过其他方式建立(see Chapter 6).