# 3.3 The Negative-U Model

Hubbard 模型中的 on-site 关联项系数 $U>0$ 似乎是必然的事情, 因为它来源于电子之间的库伦相互作用. 如果我们希望导出一个 $U<0$ 的模型, 这必须有第三方的媒介参与相互作用. 本节就讨论 $U<0$ 的 Hubbard 模型.

当我们谈论 $U<0$ 的 Hubbard 模型时, 通常是以下两种情形:

1. 纯粹是形式上的 $U<0$ 模型. 后面我们会看到, 存在一个正则变换可以将 $U>0$ 和 $U<0$ 的模型联系起来.
2. 将 $U<0$ 模型视为一个有效哈密顿量, 类似于 BCS 模型哈密顿量, 它描述了电子-电子之间的**有效吸引相互作用**, 这个吸引相互作用的建立有一些中间步骤但我们将这些细节忽略.

## $U<0$ 的不同机制

- $U<0$ 的 Hubbard 模型描述电子之间的局域吸引相互作用.
- 和 $U>0$ 的情形一样, 这两个模型都是一种**有效模型**, 其中的重整化参数都只在低频和低温时适用.
- 当电子极化出一个集体的自由度时, 它们可以通过共享**极化(polarization)**, 具有一个负的配对结合能 $-U$. 具体地，产生电子之间的吸引相互作用有很多极化机制, 比如:
  - lattice deformations (phonons),
  - collective charge oscillations (plasmons),
  - or spin fluctuations (paramagnons).
- 这种借助第三方媒介产生极化, 进而产生的吸引相互作用是需要**一定时间的**. 为了写出 Hubbard 模型, 有一个假设是, 极化机制的时间尺度 (比如声子的 Debye 频率倒数)远小于 hopping 的时间; 相比 hopping 来说, 极化可以说是瞬间完成的.
  - 这个假设刚好是 Migdal-Eliashberg's approximation for superconductivity 的反面, 详见 Schrieffer 的书.

## $U<0$ Hubbard 模型

我们所讨论的 $U<0$ Hubbard 模型一般形式如下:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{-U}=&-\sum_{ijs} t_{ij} c_{is}^{\dagger} c_{js}-\frac{U}{2} \sum_{i}\left(n_{i}-1\right)^{2} \\ &+\frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij}\left(n_{i}-1\right)\left(n_{j}-1\right)-\mu \sum_{i} n_{i}\end{aligned}$$

- negative-$U$ term: 倾向于同一格点上有成对的自旋向上和向下的电子;
- hopping term: 与 $U$ term 竞争, 会将电子给离域化, 解出电子的配对.
- $V_{ij}$: 表示不同格点上电子的库伦排斥力. 如果 $n_i, n_j$ 有一个是 1, 则这两个格点之梦没有库伦排斥力. $(n_i, n_j) = (0,0), (2,2), (0,2), (2,0)$ 这些情况是有库伦排斥力的.
    - 这一项在选择基态时起到重要的作用, 尤其是考虑接近半填充时.

## 转换为 $U > 0$ Hubbard 模型

通过一个**针对自旋向下电子的粒子-空穴变换 (particle-hole transformation only on the down-spin electrons)**, 我们可以将一个 $U < 0$ 的 Hubbard 模型转换为一个 $U > 0$ Hubbard 模型:

$$\begin{cases} c_{i\uparrow} \to \tilde{c}_{i\uparrow}, c_{i\uparrow}^\dagger \to \tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger \\ c_{i\downarrow} \to \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger \to \tilde{c}_{i\downarrow} \end{cases}$$

- 变换之后的算符 $\tilde{c}_{is}^\dagger$ 所激发的电子被称为**赝电子(pseudo-electrons)**, $\tilde{c}_{is}, \tilde{c}_{is}^\dagger$ 被称为**赝自旋算符 (pseudo-spin operators)**.
- 这是一个正则的 **Bogoliubov 变换**, 变换之后的赝电子算符 $\tilde{c}$ 依旧满足 Fermi 反对易关系.
    - 表象变换(式"2.8"[1])是把新表象下单粒子本征值 $\lambda'$ 对应的湮灭算符 $a_{\lambda'}$ 用原来表象下所有湮灭算符 $a_\lambda$ 线性组合表出, 不会用产生算符组合出湮灭算符.
    - "Bogoliubov 变换"[2]往往固定一个量子数(如这里的 $i$), 新的湮灭算符是原来的产生湮灭算符的线性组合.

$$\begin{pmatrix} \tilde{c}_{i\uparrow} \\ \tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\uparrow}^\dagger \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \tilde{c}_{i\downarrow} \\ \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{i\downarrow} \\ c_{i\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

> 数算符的定义
>
> $$\tilde{n}_i \equiv \tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i\uparrow} + \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{i\downarrow}$$
>
> 数算符 $\tilde{n}_i$ 实际上并不是 $n_i$ 直接映射而来的, 直接映射的结果如下:
>
> $$n_i = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \to \tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i\uparrow} + \tilde{c}_{i\downarrow} \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger \neq \tilde{n}_i$$

利用 $\tilde{n}_{is}^2 = \tilde{n}_{is}$(因为只取 0 和 1), 通过上述变换可以得到 $U > 0$ 的 Hubbard 模型:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}^{-U} \to \tilde{\mathcal{H}}^{+U} = & -\sum_{ij} t_{ij}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\uparrow} - \tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\downarrow}\right) + \frac{U}{2}\sum_{i}\left(\tilde{n}_i - 1\right)^2 \\
& + \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}^{a}\tilde{S}_i^z\tilde{S}_j^z - h\sum_i \tilde{S}_i^z - \mathcal{N}\Delta E
\end{aligned}
$$

- Ising anisotropy: $J_{ij}^{\alpha} = 4V_{ij}$
- 磁场: $h = 2\mu$
- 能量 shift: $\Delta E = \mu + \frac{U}{2}$

### 二分晶格(bipartite lattice)

二分晶格(bipartite lattice) 可以被分离为两个互斥的子晶格 $A$ 和 $B$, 而二分晶格中的最近邻 hopping 参数 $t_{ij}$ 只会包含两个子晶格之间的 hopping, 包括 $i \in A, j \in B$ 以及 $i \in B, j \in A$.

- 二分晶格的例子: 正方晶格(square lattices), 立方晶格(cubic lattices)
- 非二分晶格(nonbipartite lattice)的例子: 三角晶格和面心立方晶格.

$U > 0$ Hubbard 模型"equ:3.3PositiveU"[3]中的相互作用项是正的, hopping 参数的正负是依赖自旋符号的. 这在非二分晶格的物理讨论上是非常重要的特征: 符号并不能被简单的规范变换消除.

## 3.3.1 赝自旋模型和超导电性

在这一小节我们将看到, 变换"equ:3.3particle-hole-trans"[4]将负 $U$ 模型的电荷算符映射为了正 $U$ 模型的赝自旋算符, 我们会建立所有的映射字典. 这也是为什么变换后的模型也称为**赝自旋模型**.

### $z$ 方向赝自旋算符

这个变换实际上将原先的**局域电荷涨落算符**映射为了 $z$ 方向的**赝自旋算符**:

$$
\frac{1}{2}\left(n_i - 1\right) \Leftrightarrow \tilde{S}_i^z
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}\left(n_i - 1\right) \to & \frac{1}{2}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow} + \tilde{c}_{i\downarrow}\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger} - 1\right) \\
& = \frac{1}{2}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow} - \tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}\right) \\
& = \tilde{S}_i^z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger} & \tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \\ & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\tilde{c}_{i\uparrow} \\ \tilde{c}_{i\downarrow}\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

- 因此, 负 $U$ 模型中的半填充情况 $n_i = 1$ 等价于正 $U$ 模型的 $z$ 方向自旋为零; 负 $U$ 模型对半填充的偏离就相当于正 $U$ 模型中存在 $z$ 方向的均匀磁化.
- 负 $U$ 模型中的电荷密度波对应正 $U$ 模型中的 $z$ 方向自旋密度波.

## $x, y$ 方向赝自旋算符和赝升降算符

负 $U$ 模型中的**配对算符 (pairing operators)**被映射为了 $x, y$ 分量的赝自旋算符:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\left(c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger}+c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}\right) \Leftrightarrow \tilde{S}_i^x \\ \frac{1}{2i}\left(c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger}-c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}\right) \Leftrightarrow \tilde{S}_i^y \end{aligned}$$

进而得到赝升降算符$\tilde{S}_i^{\pm}=\tilde{S}_i^x \pm i\tilde{S}_i^y$的映射关系:

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} \Leftrightarrow \tilde{S}_i^{+} \\ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \Leftrightarrow \tilde{S}_i^{-} \end{aligned}$$

- $i$ 格点上同时产生一对自旋反平行的电子, 对应着此处赝自旋升算符.
- $i$ 格点上同时湮灭一对自旋反平行的电子, 对应着此处赝自旋降算符.

这种成对成对产生湮灭的图像和 BCS 超导理论是一致的. 实际上赝自旋在 $xy$ 平面上的序就代表了负 $U$ 模型中的超导电性:

$$\Psi\left(\mathbf{x}_i\right)=\Delta\left(\mathbf{x}_i\right) e^{i\phi\left(\mathbf{X}_i\right)} \Leftrightarrow \left\langle\tilde{S}_i^{+}\right\rangle$$

- 有序磁矩的幅值就是 BCS 的序参量 $\Delta$, 有序磁矩在 $xy$ 平面上的辐角就是超导相位 $\phi$. 这个 BCS 理论的结论可以参考 Schrieffer 的书.
- $\Psi$ 与一个外加的电磁规范场(电荷为 $2e$)相耦合.
- 对于一个空间慢变的 $\Psi(\mathbf{x})$ 而言, 其自由能展开正好就是 Ginzburg-Landau 自由能泛函.
- Ginzburg-Landau 理论给出了超导电性相关的许多宏观现象的解释, 如磁通量子化和无阻电流.

## 负 $U$ 模型对应的正 $U$ 模型一定是半填充的

定理: 不管负 $U$ 模型 $\mathcal{H}^{-U}$ 的电子填充情况如何($\langle n_i\rangle$ 任意取值), 正 $U$ 模型 $\tilde{\mathcal{H}}^{+U}$ 一定是刚好半填充的($\langle\tilde{n}_i\rangle=1$).

证明需要注意到正 $U$ 模型所具备的一个对称性, 在正则变换

$$\tilde{c}_{is} \rightarrow \tilde{c}_{i-s}^{\dagger}, \quad s=\uparrow,\downarrow$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{c}_{i\uparrow}^{\prime} \\ \tilde{c}_{i\uparrow}^{\prime\dagger} \\ \tilde{c}_{i\downarrow}^{\prime} \\ \tilde{c}_{i\downarrow}^{\prime\dagger} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{c}_{i\uparrow} \\ \tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger} \\ \tilde{c}_{i\downarrow} \\ \tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}$$

下, 哈密顿量 $\tilde{\mathcal{H}}^{+U}$ "equ:3.3PositiveU"[3]是保持不变的:

$$\mathcal{H}^{+U}\left[\tilde{c}^{\prime}\right]=\mathcal{H}^{+U}[\tilde{c}]$$

证明:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{-U}\rightarrow\tilde{\mathcal{H}}^{+U}=&-\sum_{ij}t_{ij}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\uparrow}-\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\downarrow}\right)+\frac{U}{2}\sum_{i}\left(\tilde{n}_{i}-1\right)^{2}\\&+\frac{1}{2}\sum_{ij}J_{ij}^{a}\tilde{S}_{i}^{z}\tilde{S}_{j}^{z}-h\sum_{i}\tilde{S}_{i}^{z}-\mathcal{N}\Delta E\end{aligned}$$

第一项:

$$\begin{aligned}\sum_{ij}t_{ij}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\uparrow}-\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\downarrow}\right)\rightarrow&\sum_{ij}t_{ij}\left(\tilde{c}_{i\downarrow}\tilde{c}_{j\downarrow}^{\dagger}-\tilde{c}_{i\uparrow}\tilde{c}_{j\uparrow}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{ij}t_{ij}\left(1-\tilde{c}_{j\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}-1+\tilde{c}_{j\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow}\right)\\&=\sum_{ij}t_{ij}\left(\tilde{c}_{j\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow}-\tilde{c}_{j\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}\right)\\&=\sum_{ij}t_{ij}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\uparrow}-\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{j\downarrow}\right)\end{aligned}$$

其中最后一个等号只在 $t_{ij}=t_{ji}$ 时成立.

第二项:

$$\tilde{n}_{i}=\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow}+\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}\rightarrow\tilde{c}_{i\downarrow}\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}+\tilde{c}_{i\uparrow}\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}=2-\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow}+\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}\right)$$

$$\tilde{n}_{i}\rightarrow\tilde{n}_{i}^{\prime}=2-\tilde{n}_{i}$$

第三项和第四项: 利用了 $z$ 方向自旋算符在上述变换下不变的特性

$$\begin{aligned}\tilde{S}_{i}^{z}=\frac{1}{2}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow}-\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}\right)\rightarrow&\frac{1}{2}\left(\tilde{c}_{i\downarrow}\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}-\tilde{c}_{i\uparrow}\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\right)\\&=\frac{1}{2}\left(1-\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}-1+\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow}\right)\\&=\frac{1}{2}\left(\tilde{c}_{i\uparrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\uparrow}-\tilde{c}_{i\downarrow}^{\dagger}\tilde{c}_{i\downarrow}\right)=\tilde{S}_{i}^{z}\end{aligned}$$

电子占据数的期望值在变换前后应当不变(正则变换不改变可观测量期望值):

$$\langle \tilde{n}_i \rangle = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}_{\tilde{c}}\left(e^{-\beta\mathcal{H}^{+U}[\tilde{c}]}\tilde{n}_i\right) = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}_{\tilde{c}'}\left[e^{-\beta\mathcal{H}^{+U}\left[\tilde{c}'\right]}\tilde{n}_i'\right] = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}_{\tilde{c}}\left[e^{-\beta\mathcal{H}^{+U}[\tilde{c}]}\left(2-\tilde{n}_i\right)\right]$$

从而两边对 $i$ 求和, 除以总格点数 $\mathcal{N}$ 就有平均占据数:

$$\mathcal{N}^{-1}\left\langle\sum_i \tilde{n}_i\right\rangle = \mathcal{N}^{-1}\left\langle\sum_i\left(2-\tilde{n}_i\right)\right\rangle = 1$$

得证.

---

这个定理的重要性在于, 我们曾在 3.2 节证明, 正 $U$ 模型在 $U$ 很大、"半填充的时候"[5]可以完全约化为一个自旋问题, 即量子海森堡模型.

## 各向异性海森堡模型

按照 "t-J 模型的导出方法"[6], 我们根据上面的定理, 只保留最后的海森堡哈密顿量, 最终得到有效的赝自旋哈密顿量:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{H}}^{+U} &\rightarrow \tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz} + \mathcal{O}\left(t^2/U\right), \\
\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz} &= \frac{1}{2}\sum_{ij}\left[\left(J_{ij}+J_{ij}^a\right)\tilde{S}_i^z\tilde{S}_j^z - J_{ij}\left(\tilde{S}_i^x\tilde{S}_j^x + \tilde{S}_i^y\tilde{S}_j^y\right)\right] - h\sum_i\tilde{S}_i^z
\end{aligned}$$

- 超交换耦合: $J_{ij} = 4t_{ij}^2/U$
- $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}$ 被称为**各向异性海森堡模型 (anisotropic Heisenberg model)**.
  - 自旋的 $x, y$ 分量之间是铁磁耦合
  - 自旋的 $z$ 分量之间是反铁磁耦合.

### 半经典近似

这个哈密顿量是量子磁性的一种模型, 可以用本书中的许多方法进行处理, 我们这里先给出半经典近似的讨论方法:

- Chapter 11: **半经典近似 (semiclassical approximation)**可以用在处于**对称破缺相(broken symmetry phases)**的二维三维体系中.
  - 经典基态: 通过取经典哈密顿量 $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}[\tilde{\mathbf{S}}]$ 的最小值得到, 其中 $\tilde{\mathbf{S}}$ 代表幅值为 $S$ 的矢量.

#### 非二分晶格: 阻挫效应和 $x-y$ 赝自旋序

对于非二分晶格的最近邻模型, $z$ 方向自旋的反铁磁耦合是阻挫的, 但 $x-y$ 方向的铁磁耦合是允许的.

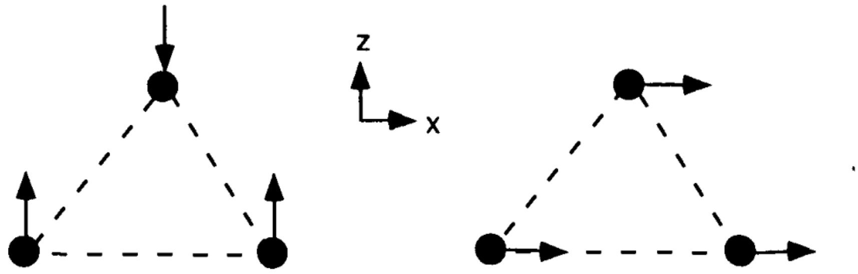


FIGURE 3.2. Frustrated $z$-spin couplings (left triangle) and satisfied $x$–$y$ couplings (right triangle) of the pseudo-spin Hamiltonian $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}$.

- 因此, 经典近似是具有 **赝自旋序**, 这对于这低温下的超导电性. 对于低维体系, 其量子涨落和热涨落较大, 磁序会被扰乱.

### 二分晶格: Ising-Heisenberg 形式

对于二分晶格, 没有上面的自旋阻挫问题. 我们将其中一个子晶格 $B$ 上所有自旋绕着 $z$ 轴转一个 $\pi$ 角, 那么 $x, y$ 自旋的耦合也将呈现反铁磁效应, 这个旋转将 $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}$ 变为了 **Ising-Heisenberg 形式**:

$$\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz} \to \tilde{\mathcal{H}}^{xxz} = \frac{1}{2}\sum_{ij}\left(J_{ij}\tilde{\mathbf{S}}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}_j + J_{ij}^a \tilde{S}_i^z \tilde{S}_j^z\right) - h\sum_i \tilde{S}_i^z$$

- $\tilde{\mathcal{H}}^{xxz}[\tilde{\mathbf{S}}]$ 的经典基态: 两个子晶格上的赝自旋指向相反.

下面我们讨论此时经典基态的简并度, 可调参数包括 Ising anisotropy $J^a$ 和外磁场 $h$.

- 对于 $J^a = 0, h = 0$ 的情形, 这就是一个基本的反铁磁海森堡模型, 其基态是 $\mathcal{O}(3)$ 简并的, 所有赝自旋可以整体转动任意角度.
- 对于 $J^a = 0, h > 0$ 的情形, 体系简并度缩小为 $\mathcal{O}(2)$ 简并, 由于一个 $z$ 方向外磁场的加入, 自旋倾向于和磁场平行, 固定一个 $z$ 分量, $x - y$ 方向依然是可以随便进行整体旋转的. 此时的序称为 **赝自旋序**($x - y$ ordering).
- 对于 Ising anisotropy $J^a > 0$ 的情形, 这一项使得体系倾向于在 $z$ 方向反平行排列.
  - 此时磁场 $h$ 和 Ising anisotropy 之间会有竞争, 决定了序磁矩的方向.
  - **Ising ordering** 和 **赝自旋序** 之间的相变可以是关于磁场 $h$ 一阶和二阶的. 这个相变在理论和实验上都有比较深入的研究, 也被应用到了铋酸盐(bismuthate)超导体的超导电性理论和 He-4 超流理论中.
  - 在经典的平均场近似下, 相变的阶数依赖于次近邻相互作用的符号.
    - 一级相变(first-order transition): 又称为 spin-flop, 在场-温度(h-T)相图中体现为一个**二临界点(bicritical point)**.
    - 二级相变(second-order transition): 存在一个中间混合相(intermediate mixed phase), 其序参量同时具有 $z$ 分量和 $x - y$ 分量, 电荷密度波和超导电性共存在这个相中.

- 对于 He, 这个混合相被称为**超固体(supersolid)**, 在本书成书的 1994 年还没有在实验上发现.

### 弱耦合时的处理方法

我们回到各向异性海森堡模型 $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}$ 的一般讨论来.

- $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}$ 的导出所需要的一个重要假设就是 3.2 节的标题: 大 $U$ 极限 $|U| \gg t$. 这个假设说明, $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}$ 描述的体系的特点是, 电子倾向于成对束缚在晶格常数的尺度上.
- 对于不满足这个极限的情形, $|U| < t$, 我们如何处理? 可以采用关于相互作用强度 $U$ 的微扰论, 或者用 4.1 节中会介绍的**变分磁性态(variational magnetic states)**来描述系统.

不管是弱耦合还是强耦合情形, 当电荷激发存在带隙时, 它们在定性上是类似的 (强弱对偶?).

- 在弱耦合时, 这样一个带隙会在**"费米面嵌套( Fermi surfrac nesting)"**[7] 时出现, 即 Fermi 面的大部分区域都是互相平行的.
- 此时强耦合条件下导出的赝自旋模型 $\tilde{\mathcal{H}}^{-x-xz}$ 可以视为弱耦合的一个有效模型, 其粗粒化程度超过一个库伯对的大小, 也就是此时"晶格常数"需要被超导的关联长度所替代.

---

1.
2.
3.
4.
5. ## 半填充情形

   我们先考虑平均 1 格点 1 电子的半填充模型, 此时的基态是每个格点上都有一个电子. 由于不存在低能的 hopping 过程, $\mathcal{T}$ 和 $\mathcal{J}'$ 都会被 $P_s$ 消灭掉.

   这就是一个 Mott 绝缘体相, 体系并不能低能地从基态激发到激发态.

   只有磁性相互作用项 $\mathcal{H}^{\mathrm{QHM}}$ 在投影 $P_s$ 下存留了下来, 这称为**量子海森堡模型(quantum Heisenberg model)**. 因此, 我们认为 在 $U/t \gg 1$ 时、体系接近半填充时, Hubbard 模型中的反铁磁相互作用是非常重要的, 这也是这本书后面会大加讨论的模型.

   $$\mathcal{H}^{QHM} = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{n_i n_j}{4}\right)$$

6. ## t-J 模型的导出

   当 $U/t \gg 1$ 时, 零阶哈密顿量是关联项:

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

$\mathcal{U}$ 的本征态是万尼尔表象中的 Fock 态, 在节中我们曾用两格点模型讨论过基态: 自旋极化态和单占据态; 以及激发态: 双激发态. 这里也是差不多的:

- **基态子空间 (单占据态子空间)**: 每个格点上少于等于一个电子. 如果是半满体系, 刚好就是一格点一电子, 简并度只在自旋的分布上; 对于不足半满体系, 简并度还有一个分配的组合因子在.

$$S = [|n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, n_{2\uparrow} \ldots\rangle \quad : \quad \forall i, n_{i\uparrow} + n_{i\uparrow} \leq 1]$$

- **激发态子空间 (双占据态子空间)**:

$$D = [|n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, n_{2\uparrow} \ldots\rangle \quad : \exists i, n_{i\uparrow} + n_{i\uparrow} = 2]$$

Hopping 项则视为一个微扰项:

$$\mathcal{T} = -\sum_{ijs} t_{ij} c_{is}^{\dagger} c_{js}$$

- $\mathcal{T}$ 将基态子空间 $S$ 和激发态子空间 $D$ 耦合了起来, 可以通过一个电子的 hopping, 实现基态和激发态之间的双向变化.
- $\mathcal{U}$ 是对角的($\langle d|\mathcal{U}|s\rangle = 0$), $\mathcal{T}$ 解除了两个子空间中巨大无比的简并度.

## 投影矩阵

进入到多格点模型, 采用投影矩阵法是比较方便的. 上面我们已经通过零阶哈密顿量 $\mathcal{U}$ 将 Hilbert 空间分为了基态子空间和激发态子空间, 现在我们引入对应的投影矩阵 $P_s, P_d$, 则 $\mathcal{H}$ 可以写为分块的形式:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} P_s(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_s & P_s\mathcal{T}P_d \\ P_d\mathcal{T}P_s & P_d(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_s\mathcal{T}P_s & P_s\mathcal{T}P_d \\ P_d\mathcal{T}P_s & P_d(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_d \end{pmatrix}$$

其中利用了 $\mathcal{U}$ 对角的结论.

## 预解算子 (resolvent operator)

定义预解算子 $\mathcal{G}(E)$:

$$\mathcal{G}(E) = (E - \mathcal{H})^{-1}$$

> 预解算子实际上是格林函数

其中 $E$ 是一个数, 或者说 $E$ 乘上一个单位算符. 将预解算子投影到基态子空间 $S$:

$$P_s\mathcal{G}(E)P_s = P_s[E-H]^{-1}P_s = \left[E - \mathcal{H}^{eff}(E)\right]^{-1}$$

$$\mathcal{H}^{eff} = P_s\mathcal{T}P_s + P_s\mathcal{T}\left\{P_d[E-(\mathcal{U}+\mathcal{T})]P_d\right\}^{-1}\mathcal{T}P_s$$

> $$E-H=\begin{pmatrix} E-P_s(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_s & -P_s\mathcal{T}P_d \\ -P_d\mathcal{T}P_s & E-P_d(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_d \end{pmatrix}^{-1}$$
>
> $$\begin{aligned} & E-\mathcal{H}^{eff}(E) \\ & = E-P_s(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_s - P_s\mathcal{T}P_d\left[E-P_d(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_d\right]P_d\mathcal{T}P_s \\ & = E-P_s\mathcal{T}P_s - P_s\mathcal{T}P_d\left[E-P_d(\mathcal{T}+\mathcal{U})P_d\right]^{-1}P_d\mathcal{T}P_s \\ & = E-P_s\mathcal{T}P_s - P_s\mathcal{T}\left\{P_d\left[E-(\mathcal{T}+\mathcal{U})\right]P_d\right\}^{-1}\mathcal{T}P_s \end{aligned}$$
>
> 第一个等号利用了一个矩阵恒等式:
>
> $$\left[\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1}\right]_{ss} = \left(A-BD^{-1}C\right)^{-1}$$
>
> $ABCD$ 代表一个矩阵的不同分块, $ss$ 代表左上分块, 也就是 $A$ 所处的位置. 如果这些分块都是 $1\times 1$ 的, 这个恒等式就是熟悉的求逆公式:
>
> $$\begin{gathered} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad-cb}\begin{pmatrix} d & b \\ c & a \end{pmatrix} \\ \frac{d}{ad-cb} = \frac{1}{a-bc/d} \end{gathered}$$
>
> 具体的证明还未做. 见 blockmatrixinverse.pdf.

预解算子的作用在于求解 $\mathcal{H}$ 的一些本征值. 将预解算子在投影到基态子空间前后的表达式做对比,

$$\mathcal{G}(E)=(E-\mathcal{H})^{-1} \Rightarrow P_s\mathcal{G}(E)P_s = \left(E-\mathcal{H}^{\text{eff}}\right)^{-1}$$

我们看到新定义的有效哈密顿量 $\mathcal{H}^{\text{eff}}$ 在基态子空间中占据着总空间中 $\mathcal{H}$ 的地位. $P_s\mathcal{G}(E)P_s$ 对应的特征多项式

$$\det\left|E_n-\mathcal{H}^{eff}(E_n)\right|=0$$

将给出一些本征值 $E_n$, 这些本征值对应那些**在基态子空间 中具有非零权重的态**. $E_n$ 并不是 $\mathcal{H}^{eff}$ 的本征值, 因为有效哈密顿量 $\mathcal{H}^{eff}$ 本身就参数性地依赖于本征值 $E$.

## 忽略格点的数目很多带来的问题: t-J 模型

如果我们暂时忽略格点的数目很多带来的问题, 是有办法将有效哈密顿量中的 $P_d(E-\mathcal{H})^{-1}P_d$ 展开的, 展开到 $E/U$ 的一阶, $t/U$ 的二阶, 最终结果是:

$$\mathcal{H}^{eff} \to \mathcal{H}^{t-J}[1+\mathcal{O}(E/U)+\mathcal{O}(t/U)]$$

$$\mathcal{H}^{t-J} = P_s \left[ \mathcal{T} - \frac{1}{U} \sum_{ijkss'} t_{ij} t_{jk} c^\dagger_{is} c_{js} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} c^\dagger_{js'} c_{ks'} \right] P_s$$

这就是 t-J 模型.

## 格点数目很多所带来的问题的解决: 改变能量零点

- 格点数目很多的极限下 $\mathcal{N} \to \infty$, 电子数目随之增多, 基态能量 $E_0$ 是**广延的(extensive)**, 它是这些电子零点能量的加和, 因此也会随着 $\mathcal{N}$ 增大不断同步增大.
- 因此, 此时将 $E$ 认为是小量, $E/U$ 认为是小量, 进而将 $\mathcal{H}^{eff}(E)$ 在 $E=0$ 附近展开是不成立的.
- 我们需要改变能量的零点

$$E^0 \to E_0' = E_0^d - U$$

  其中 $E_0^d$ 也是广延量, 它是 Hubbard 模型在双占据子空间 $D$ 中的最低能量.

  - 如果我们放弃对 Hubbard 模型基态能量的了解, 我们就不需要真正地去计算$E_0^d$.
  - 因此我们仅仅将 $\mathcal{H}^{t-J}$ 应用在低层元激发和波函数的描述上.
  - 这个能量零点的 shift 实际上正是 Brillouin-Wigner and Rayleigh-Schrodinger perturbation theories 的区别之处, 参考文献可以看 Problem 3.6 in J.W. Negele and H.Orland, Quantum Many Particle Systems (Addison-Wesley, 1988).
- 定义了新的能量零点 $E_0'$ 之后, 我们永远会有 $|E-E_0'| \ll U$ , 因此可以在热力学极限下以 $E_0'$ 为中心做展开, 得到和 $E$ 无关的有效哈密顿量, 即 t-J 模型.

7. - 在一维体系中, 位于 $-k_F$ 处的费米面平移 $2k_F$ 之后就会和 $+k_F$ 的费米面完全重合, 这种现象被称为费米面嵌套(Fermi surface nesting), 这个平移矢量被称为嵌套矢量(nesting vector).