7.2 モット絶縁体の有効ハミルトニアン

Minoru Takahashi, J. Phys. C: Solid State Phys., 10,1289 (1977) と Toshio Kato, Prog. Theo. Phys. 4, 514 (1949), にそって縮退摂動論により，ハーフフィルドのハバード模型の有効模型を導出する。

7.2.1 縮退摂動論の一般論 $\boxed{\text{（加藤の方法）}}$

まず，一般の縮退摂動論を上記の論文に沿って説明する。

2^N の縮退　N : サイト数

t : ホッピング → 縮退がとける

摂動論

Hubbard model (half filled)

→ Heisenberg model (強結合. 小さ)

- **射影演算子と Resolvelnt**

ハミルトニアン H に対して，その規格直交化した完全な固有状態を $|n\rangle$, $n = 1, 2, \cdots$ とすれば，

$$H|n\rangle = |n\rangle E_n, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad 1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

規格直交　　完全性

なので

$$H = H \cdot 1 = H\sum_n |n\rangle\langle n| = \boxed{\sum_n |n\rangle E_n \langle n|}$$
$$= \sum_n E_n P_n, \quad P_n = |n\rangle\langle n|$$

ここで $P_n = |n\rangle\langle n|$ は固有状態 n への射影演算子であり，固有状態の完全性と規格直交性から次の性質をみたす。

$$\boxed{\sum_n P_n = 1}$$

$$\boxed{P_n P_m = |n\rangle\langle n|m\rangle\langle m| = \delta_{nm} P_n}$$

$P_n^2 = P_n$

固有状態のなかで $n = 1, 2, \cdots, M$ をとりだして

$$\boxed{P = P_1 + \cdots + P_M}$$

$$Q = 1 - P$$

としたものも次の性質を満たし射影演算子となる。

$P_1^2 + P_2^2 + \cdots + P_M^2 = P$

$$P^2 = P$$

$$Q^2 = 1 - 2P + \underbrace{P^2}_{P} = 1 - P = Q$$

$$\boxed{P + Q = 1}$$

Resolvent 演算子 $R(z)$ を次のように定義すると

$$\boxed{R(z) = \frac{1}{z - H}}$$

$= (z - H)^{-1}$

z 複素数　$z \in \mathbb{C}$

これは

$$R(z) = \sum_n \frac{P_n}{z - E_n}$$

となる。これは $z - H = \sum_m (z - E_m) P_n$ に注意すれば，次のように確認できる

$m = n$

$$(z - H) \cdot R(z) = \sum_m (z - E_m) P_m \sum_n \frac{P_n}{z - E_n} = 1$$

$= \sum_n P_n$

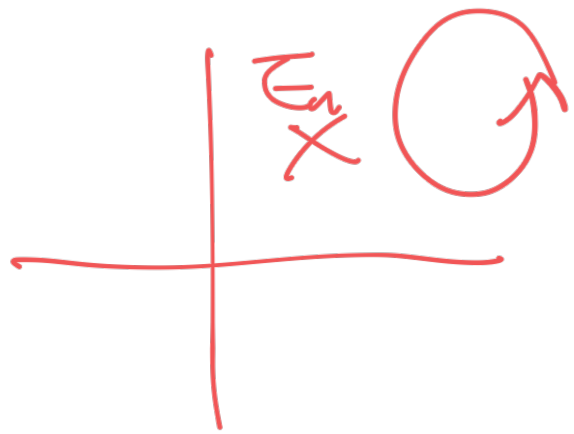
さらに複素平面上の正の向きの閉曲線 C に対して留数定理（コーシーの積分定理）から

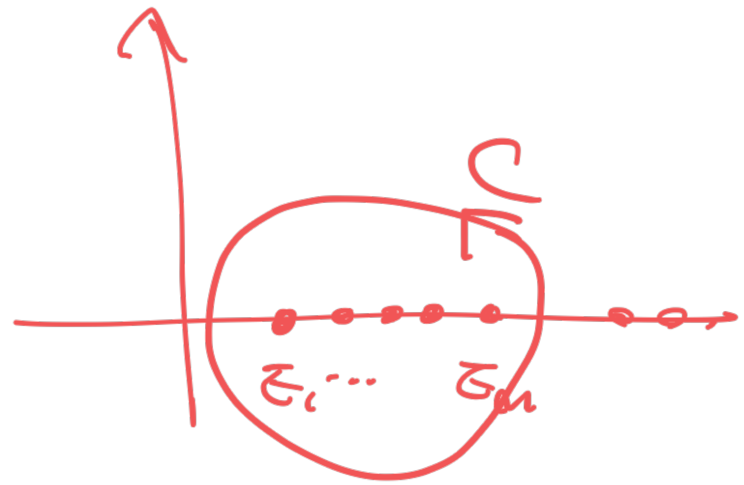
$$\frac{1}{2\pi i}\int_C dz\,\frac{1}{z-E_n}=\begin{cases}1 & E_n\text{が}\,C\,\text{の内部に含まれる}\\ 0 & E_n\text{が}\,C\,\text{の内部に含まれない}\end{cases}$$

となるので C を $E_1,\cdots,E_M$ のみを含む閉曲線とすれば

$$P=\boxed{P_1+\cdots+P_M}=\frac{1}{2\pi i}\int_C dz\,R(z)$$

となる。





- **縮退した系の摂動展開**

ハミルトニアン H_0 の基底状態が m 重に縮退していて，そのエネルギーを E_0 とする。

$$H_0|i\rangle = |i\rangle E_0, \ i = 1, \cdots, m$$

この時，摂動 λV を取り入れた全系のハミルトニアンを H と書こう。

$$H = H_0 + \lambda V$$

非摂動項

複素平面の閉曲線 C を E_0 を囲み，それ以外の H ならびに H_0 の固有値は含まないものに取ろう。この時，前節の議論にしたがって

$$P = \frac{1}{2\pi i}\int_C dz\,\frac{1}{z-H} = \frac{1}{2\pi i}\int_C dz\,(z-H_0-\lambda V)^{-1} \qquad //$$

は $\lambda = 0$ の非摂動状態で縮退した状態が連続に変化した固有状態全体への射影演算子となる。ここで，以下の関係式に注意して[8]

$$\begin{aligned}
(z-H_0-\lambda V)^{-1} &= \left[\left(1-\lambda V(z-H_0)^{-1}\right)(z-H_0)\right]^{-1} \\
&= (z-H_0)^{-1}\left(1-\lambda \underbrace{V(z-H_0)^{-1}}_{x}\right)^{-1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n (z-H_0)^{-1}\left[V(z-H_0)^{-1}\right]^n \\
&= R_0(z) + \sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n \overbrace{R_0(z)V R_0(z)\cdots V}^{n} R_0(z)\ (V\ が\ n\ 個)
\end{aligned}$$

$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

$(1-x)^{-1}$

$= 1+x+x^2+\cdots$

$= \sum_{n=0} x^n$

ここで $R_0(z) = (z-H_0)$ は H_0 の Resolvent である。

ここで $R_0(z) = (z - H_0)$ は H_0 の Resolvent である。さらにエネルギー E_0 で m 重に縮退した $|n\rangle$, $n = 1, \cdots, m$ を特別視して以下のように書く。

$$H_0|n\rangle = |n\rangle E_0, \ n = 1, \cdots, m$$

$$H_0|m\rangle = |m\rangle E_m, \ n = m+1, \cdots$$

$$P_0 \equiv \sum_{n=1}^{m} |n\rangle\langle n|, \quad H_0 P_0 = E_0 P_0$$

$P_0(1-P_0)=0$

$\|$

$$P_n \equiv |n\rangle\langle n|, \quad H_0 P_n = E_n P_n, \ n = m+1, \cdots$$

$(1-P_0)P_0$

$= P_0 - P_0^2 = 0$

$$R_0(z) = \frac{1}{z - H_0} = \left(P_0 + (1 - P_0)\right)\frac{1}{z - H_0}$$

$$= \frac{P_0}{z - H_0} + \frac{1 - P_0}{z - H_0}$$

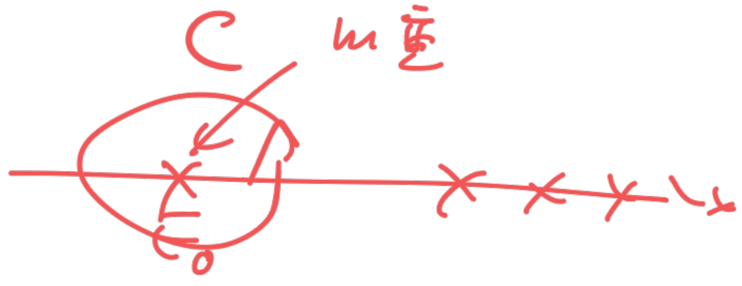
$$= \frac{P_0}{z - E_0} + \sum_{n=m+1} \frac{P_n}{z - E_n}$$

$P_0 S_0(z) = 0$

$S_0(z) P_0 = 0$

$$= \frac{P_0}{z - E_0} + S_0(z) \qquad S_0(z) = \frac{1 - P_0}{z - H_0} = \sum_{n=m+1} \frac{P_n}{z - E_n}$$

$$S_0(z) = \frac{1-P_0}{z-H_0} = \boxed{\sum_{n=m+1} \frac{P_n}{z-E_n}}$$



は C 内で正則である。よってこれを E_0 周りで展開すれば

$$S_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(z-E_0)^k \frac{d^k}{dz^k} S_0(z)\bigg|_{z=E_0}$$

$1-P_0 = (1-P_0)^k$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} (-)^k (z-E_0)^k \frac{1-P_0}{(E_0-H_0)^{k+1}}$$

$S_0^k(E_0)$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} (-)^k (z-E_0)^k \left[S_0(E_0)\right]^{k+1}$$

$k+1 \to k$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} (-)^{k-1} (z-E_0)^{k-1} \left[S_0(E_0)\right]^{k}$$

$S_0(E_0) \Rightarrow -P_0$

$k=0$ として

$\frac{1}{z-E_0}$

$$\frac{P_0}{z-E_0} = (-)^{k-1}(-P_0)(z-E_0)^{k-1}$$

$$S^k = \begin{cases} -P_0 & k = 0 \\ S_0(E_0) = \frac{1-P_0}{E_0-H_0} & k \geq 1 \end{cases}$$

として

$$R_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k-1} S^k (z - E_0)^{k-1}$$

$-1 = k_1 + \cdots + k_{n+1} - (n+1) = k_1 - 1 + k_2 - 1 + \cdots + k_{n+1} - 1$

$(z-E_0)$

$$P = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \, \frac{1}{z - H}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \left[\underbrace{R_0(z)}_{\frac{1}{z-H_0}} + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \overset{k_1}{R_0(z)} V \overset{k_2}{R_0(z)} \cdots V \overset{k_{n+1}}{R_0(z)} \ (V \text{ が } n \text{ 個}) \right]$$

$$= P_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \sum_{k_1+\cdots+k_{n+1}-(n+1)=-1, k_i \geq 0} S^{k_1} V S^{k_2} \cdots V S^{k_{n+1}} (-)^{k_1+k_2+\cdots+k_{n+1}-(n+1))}$$

$$= P_0 - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \sum_{k_1+\cdots+k_{n+1}=n, k_i \geq 0} S^{k_1} V S^{k_2} \cdots V S^{k_{n+1}}$$

Kato

$n=1$

低次の項を書き下せば
$$P = P_0 - \lambda(S^0 V S^1 + S^1 V S^0) + \cdots$$
$$= P_0 + \lambda(P_0 V S^1 + S^1 V P_0) + \cdots$$

ここで $|\Phi\rangle$ を m 重に縮退した非摂動状態として H_0 から H へハミルトニアンが連続に微小変形されていることを仮定すれば $P|\Phi\rangle$ は H の基底状態と有限の重なりを持つ。よって

P_0

$$HP|\Phi\rangle = P|\Phi\rangle E$$

P_0

である（ただし一般に $\langle\Phi|P|\Phi\rangle < 1$）。ここで $P_0|\Phi\rangle = |\Phi\rangle$ だから

H'

$$P_0HPP_0|\Phi\rangle = P_0PP_0|\Phi\rangle E$$

これは $H' = P_0HPP_0 = P_0PHP_0$, $\boxed{O = P_0PP_0}$ として，以下の一般化固有値問題

$$\boxed{H'|\Phi\rangle = O|\Phi\rangle E}$$

一般化固有値問題

だから，変形して以下の固有値問題となる。

$$h|\Phi'\rangle = E|\Phi'\rangle,$$
$$\boxed{h = O^{-1/2}H'O^{-1/2}}$$
$$\boxed{|\Phi'\rangle = O^{1/2}|\Phi'\rangle,}$$

この h が有効ハミルトニアンである。

$$= P_0^2\left[P_0 - (P_0 - P)\right]P_0 = P_0\left[P_0 - P_0(P_0 - P)\right]P_0$$

$$P_0 P P_0 = P_0\left[P_0 - (P_0 - P)\right]P_0 = P_0\left[1 - (P_0 - P)\right]P_0$$

$$
\begin{aligned}
(P_0 P P_0)^{-1/2} &\equiv P_0 (P_0 P P_0)^{-1/2} P_0 \\
&= P_0\left[1 - (P_0 - P)\right]^{-1/2} P_0 \\
&= P_0 + P_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}(P_0 - P)^n P_0 \\
&= P_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\left[P_0 (P_0 - P) P_0\right]^n
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(1+x)^{-1/2} &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} x^n \frac{1}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(1+x)^{-1/2}\Big|_{x=0} \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} x^n \frac{1}{n!}\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)\cdots\left(-\frac{n}{2}\right) \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} x^n (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}
\end{aligned}
$$

$$(1-x)^{-1/2} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} x^n$$

これを使って最低次の有効ハミルトニアンを書き下そう。$k \geq 1$ に対して $P_0 S^k = 0$, $S^k P_0 = 0$ に注意して

$$
\begin{aligned}
(P_0 P P_0)^{-1/2} &= P_0 (P_0 P P_0)^{-1/2} P_0 \sim P_0 + \frac{1}{2} P_0 (P_0 - P) P_0 \\
&= P_0 + \mathcal{O}(\lambda^2)
\end{aligned}
$$

$$
P P_0 = P_0 + \lambda S V P_0
$$

だから

$$
\begin{aligned}
H' = P_0 H P P_0 &= P_0 (E_0 + \lambda V)(P_0 + \lambda S V P_0) \\
&= E_0 P_0 + \lambda P_0 V P_0 + \lambda^2 P_0 V S V P_0
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
h &= (P_0 P P_0)^{-1/2} (H_0 + \lambda V) P (P_0 P P_0)^{-1/2} \\
&= h_0 + \lambda h_1 + \lambda^2 h_2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
h_0 &= E_0 P_0 \\
h_1 &= P_0 V P_0 \\
h_2 &= P_0 V S V P_0
\end{aligned}
$$