### 7.2.2　ハーフフィルドのハバード模型の有効ハミルトニアン

この摂動論を $U \gg t$ としてハーフフィルドのハバード模型に適用する。

$$H_0 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{\downarrow}$$

$2^N = m$

$$V = t \sum_{i<j} (X_{ij} + X_{ji})$$

$$X_{ij} = c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} = \sum_s c_{is}^{\dagger} c_{js}$$

とする。この時 $\lambda$ の一次の項は対称性により消える（確認せよ）ので最低次の有効ハミルトニアンは $h_2$ であり，中間状態でエネルギーが $U$ だけ増加することに注意すれば

$$\begin{aligned} h_2 &= P_0 VSV P_0 \\ &= -\frac{t^2}{U} \sum_{i<j} P_0 (X_{ij} X_{ji} + X_{ji} X_{ij}) P_0 \end{aligned}$$

$P_0$ は各サイトに１電子のみが存在する空間への射影であることに注意して

$$
\begin{aligned}
P_0 X_{ij} X_{ji} P_0 &= \sum_s (c_{is}^\dagger c_{js} \cdot c_{js}^\dagger c_{is} + c_{i-s}^\dagger c_{j-s} \cdot c_{js}^\dagger c_{is}) \quad (-)^3 \\
&= \sum_s (n_{is}(1 - n_{js}) \underset{-}{\cancel{+}} c_{i-s}^\dagger c_{is} c_{js}^\dagger c_{j-s}) \\
&= n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - n_{i\uparrow} n_{j\uparrow} - n_{i\downarrow} n_{j\downarrow} - S_i^- S_j^+ - S_i^+ S_j^-
\end{aligned}
$$

$(i \leftrightarrow j)$

$$
\begin{aligned}
h_2 &= -\frac{t^2}{U}\sum_{i<j}\left[n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow}+n_{j\uparrow}+n_{j\downarrow}-2n_{i\uparrow}n_{j\uparrow}-2n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}-2(S_i^- S_j^+ + S_i^+ S_j^-)\right]\\
&= -\frac{t^2}{U}\sum_{i<j}\left[n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow}+n_{j\uparrow}+n_{j\downarrow}-2n_{i\uparrow}n_{j\uparrow}-2n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}-4\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j+(n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow})(n_{j\uparrow}-n_{j\downarrow})\right]\\
&= -\frac{t^2}{U}\sum_{i<j}\left[n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow}+n_{j\uparrow}+n_{j\downarrow}-n_{i\uparrow}n_{j\uparrow}-n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}-n_{i\uparrow}n_{j\downarrow}-n_{i\downarrow}n_{j\uparrow}-4\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j\right]\\
&= -\frac{t^2}{U}\sum_{i<j}\left[n_i+n_j-(n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow})(n_{j\uparrow}+n_{j\downarrow})-4\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j\right]\\
&= \frac{4t^2}{U}\sum_{i<j}\left(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j-\frac{1}{4}n_in_j+\frac{1}{4}(n_i+n_j)\right)\\
&= J\sum_{i<j}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j+const. \qquad J=\frac{4t^2}{U}
\end{aligned}
$$

$h_2 \sim J \sum_{i<j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, $J > 0$

↑↓↑↓↑ ネール状態

これは反強磁性ハイゼンベルグ模型であり，ハーフフィルドのハバード模型が反強磁性的であることを示す。

なお，この反強磁性ハイゼンベルグ模型は，1,2,3 次元において（スピンの）励起ギャップはゼロであり，対称性の破れに伴い二次元以上で基底状態の磁化が有限であることが知られている。