# 22 Das $t$-$J$-Modell

Im Grenzfall großen $U$s wird die Anzahl der Doppelbesetzungen an einem Gitterplatz minimal sein. Daher wird für $n < 1$ keine Doppelbesetzung auftreten, bei $n > 1$ hat man Doppelbesetzung, aber kein Gitterplatz wird leer bleiben. Bei $n = 1$ wird jeder Gitterplatz genau einmal besetzt sein. Die zusätzlichen Elektronen werden sich dann auf dem Hintergrund dieser Einfachbesetzung bewegen. Tatsächlich gibt es natürlich virtuelle Anregungen, bei denen die Doppelbesetzung höher ist. Dabei springt ein Elektron auf einen bereits einfach besetzten Platz, unmittelbar danach springt dieses oder das andere Elektron zurück. Springt das andere zurück, so bedeutet das einen Austausch zwischen den Spins der benachbarten Elektronen und damit eine effektive Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins. Diese wollen wir nun berechnen. Dazu teilen wir den Hamilton-Operator in drei Anteile,

$$H = H_0 + H_+ + H_- + H_{\text{int}}. \tag{22.1}$$

Dabei ist $H_0$ der Anteil der kinetischen Energie, bei dem sich die Anzahl der Doppelbesetzungen nicht ändert, $H_+$ erhöht die Anzahl der Doppelbesetzungen um 1, $H_-$ vermindert sie um 1. Hierzu zerlegen wir

$$c_s^\dagger(\mathbf{R}) = e_s^\dagger(\mathbf{R}) + d_s^\dagger(\mathbf{R}), \quad e_s^\dagger(\mathbf{R}) = (1 - n_{-s}(\mathbf{R}))c_s^\dagger(\mathbf{R}), \quad d_s^\dagger(\mathbf{R}) = n_{-s}(\mathbf{R})c_s^\dagger(\mathbf{R}). \tag{22.2}$$

$e^\dagger$ erzeugt ein Elektron an einem leeren Platz, während $d^\dagger$ ein Elektron an einem Platz erzeugt, der schon mit einem Elektron mit umgekehrter Sprinrichtung besetzt ist.

$$\begin{aligned}
H_0 &= \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} \left(e_s^\dagger(\mathbf{R})e_s(\mathbf{R}') + d_s^\dagger(\mathbf{R})d_s(\mathbf{R}')\right), &(22.3)\\
H_+ &= \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} d_s^\dagger(\mathbf{R})e_s(\mathbf{R}), &(22.4)\\
H_- &= \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} e_s^\dagger(\mathbf{R})d_s(\mathbf{R}'), &(22.5)\\
H_{\text{int}} &= U\sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}). &(22.6)
\end{aligned}$$

Nun wollen wir $H_+$ und $H_-$ eliminieren. Wir führen wieder eine unitäre Transformation durch

$$H_{\text{eff}} = \mathrm{e}^{-S}H\mathrm{e}^{S} \tag{22.7}$$

mit

$$S = S_+ - S_-, \quad S_- = S_+^\dagger \tag{22.8}$$

Wir nehmen an, dass $S$ von Ordnung $t/U$ ist. Dann erhalten wir Beiträge in Ordnung $U$, $t$ und $t^2/U$, wobei wir in letzterer Ordnung nur die Beiträge mitnehmen, die die Anzahl der Doppelbesetzungen erhalten,

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= H_{\text{int}} + H_0 + \left(H_+ + [H_{\text{int}}, S_+]\right) + \left(H_- - [H_{\text{int}}, S_-]\right)\\
&+ ([H_-, S_+] - \frac{1}{2}[[H_{\text{int}}, S_-], S_+] + (-[H_+, S_-] - \frac{1}{2}[[H_{\text{int}}, S_+], S_-]). \qquad (22.9)
\end{aligned}$$

Mit der Forderung

$$H_+ + [H_{\text{int}}, S_+] = 0, \quad H_- - [H_{\text{int}}, S_-] = 0 \tag{22.10}$$

reduziert sich $H_{\text{eff}}$ auf

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{int}} + H_0 + \frac{1}{2}([H_-, S_+] - [H_+, S_-]). \tag{22.11}$$

Wir beobachten, dass

$$[H_{\text{int}}, H_+] = UH_+, \quad [H_{\text{int}}, H_-] = -UH_-, \tag{22.12}$$

da $H_{\rm int}$ gerade $U$ mal der Doppelbesetzung ist. Daher wird (22.10) mit

$$S_+ = -\frac{1}{U}H_+, \quad S_- = -\frac{1}{U}H_- \tag{22.13}$$

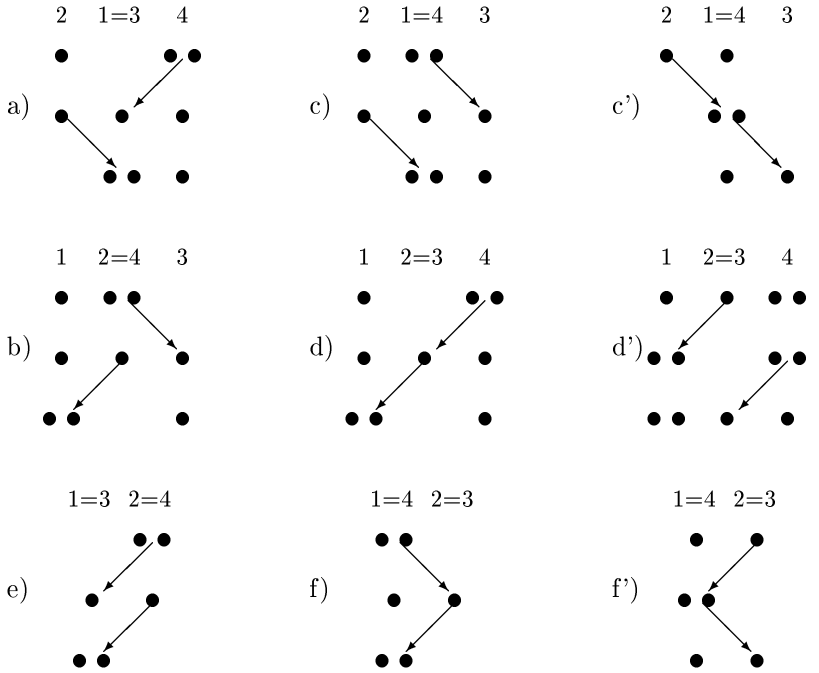
gelöst und wir erhalten

$$H_{\rm eff} = H_{\rm int} + H_0 + \frac{1}{U}[H_+, H_-]. \tag{22.14}$$

Der Kommutator

$$[H_+, H_-] = \sum t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_4} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1)e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3)d_{s'}(\mathbf{R}_4)] \tag{22.15}$$

enthält verschiedene Beiträge. Wenn alle vier Orte von einander verschieden sind, verschwindet der Kommutator. Es bleiben Beiträge mit zwei verschiedenen Orten und drei verschiedenen Orten, wobei wir davon ausgehen, dass wir nur Beiträge mit $\mathbf{R}_2 \neq \mathbf{R}_1$ und $\mathbf{R}_4 \neq \mathbf{R}_3$ haben. Wir wollen diese kurz aufführen:




Dabei erhalten wir auf Grund des Kommutators $[d^\dagger e, e^\dagger d] = d^\dagger e e^\dagger d - e^\dagger d d^\dagger e$ jeweils zwei Beiträge, wobei in drei Fällen aber einer davon verschwindet.
a) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1$ und die beiden anderen Orte verschieden davon beschreibt einen Prozess bei dem von dem einfach besetzten Ort $\mathbf{R}_2$ und dem doppelt besetzten Ort $\mathbf{R}_4$ je ein Elektron auf den bisher unbesetzten Ort $\mathbf{R}_1$ springen. Da es energetisch ungünstig ist, wenn unbesetzte Plätze simultan mit doppelt besetzten bestehen, ist dieser Prozess sehr unwahrscheinlich.
b) $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_2$. Dies ist der umgekehrte Prozess. Die Elektronen des doppelt-besetzten Punktes $\mathbf{R}_2$ springen auf den schon einfach besetzten Ort $\mathbf{R}_1$ und den unbesetzten Ort $\mathbf{R}_3$. Auch hier liegt ein leeerer Platz neben einem mit doppelter Besetzung, was ebenfalls unwahrscheinlich ist.
c) $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_1$ und $\mathbf{R}_2$ und $\mathbf{R}_3$ verschieden davon. Dieser Beitrag liefert

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1)e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3)d_{s'}(\mathbf{R}_1)] \\
= & -\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3)e_s(\mathbf{R}_2)[d_s^\dagger(\mathbf{R}_1), d_{s'}(\mathbf{R}_1)]_+ \\
= & \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3,s} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} \Big(-e_s^\dagger(\mathbf{R}_3)e_s(\mathbf{R}_2)n_{-s}(\mathbf{R}_1) + e_{-s}^\dagger(\mathbf{R}_3)e_s(\mathbf{R}_2)c_s^\dagger(\mathbf{R}_1)c_{-s}(\mathbf{R}_1)\Big)
\end{aligned} \tag{22.16}$$

$$= \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} \left( \sum_{\alpha,s,s'} e_s^\dagger(\mathbf{R}_3)\sigma^\alpha_{s,s'} e_{s'}(\mathbf{R}_2) S^\alpha(\mathbf{R}_1) - \frac{1}{2}\sum_s e_s^\dagger(\mathbf{R}_3) e_s(\mathbf{R}_2) n(\mathbf{R}_1) \right). \tag{22.17}$$

mit

$$S^\alpha(\mathbf{R}) = \frac{1}{2}\sum_{s,s'} c_s^\dagger(\mathbf{R})\sigma^\alpha_{s,s'} c_{s'}(\mathbf{R}) \tag{22.18}$$

Bei der Umformung von (22.16) nach (22.17) wurde

$$2\delta_{s_1,s_4}\delta_{s_2,s_3} = \delta_{s_1,s_2}\delta_{s_3,s_4} + \sum_\alpha \sigma^\alpha_{s_1,s_2}\sigma^\alpha_{s_3,s_4} \tag{22.19}$$

verwendet. Dies ist ein Prozess, bei dem ein Elektron auf einen Platz des gleichen Untergitters springt. Dieser Prozess hängt vom Spin eines dritten Elektrons ab und kann diesen sogar verändern. Ist das System im antiferromagnetischen Zustand, so ist dieses dritte (benachbarte) Elektron meist in Gegenrichtung ausgerichtet, so dass man näherungsweise ein Hüpfmatrix-Element $t'_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_2} = \sum_{\mathbf{R}_1} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} /U$ erhält.
d) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_2$ ergibt einen ähnlichen Beitrag

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) d_{s'}(\mathbf{R}_4)] \\
=& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{s'}(\mathbf{R}_4) [e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2), e_s(\mathbf{R}_2)]_+ \\
=& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4,s} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} \left( d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_s(\mathbf{R}_4)(1-n_{-s}(\mathbf{R}_2)) + d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{-s}(\mathbf{R}_4) c_{-s}^\dagger(\mathbf{R}_2) c_s(\mathbf{R}_2) \right) \qquad (22.20) \\
=& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} \left( \sum_{\alpha,s,s'} d_s^\dagger(\mathbf{R}_1)\sigma^\alpha_{s,s'} d_{s'}(\mathbf{R}_4) S^\alpha(\mathbf{R}_2) + \frac{1}{2}\sum_s d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_s(\mathbf{R}_4)(2-n(\mathbf{R}_2)) \right). \qquad (22.21)
\end{aligned}$$

Auch hier erhält man wie unter c) ein Hüpf-Matrix-Element zwischen zwei Plätzen auf dem gleichen Untergitter unter Mitwirkung eines dritten Elektrons bei $\mathbf{R}_2$. Im Antiferromagneten wird der Spin des zusätzlichen Elektrons, das zur Doppelbesetzung führt, in umgekehrter Richtung ausgerichtet sein wie die Spins des gleichen Untergitters. Daher ist der Spin des Elektrons bei $\mathbf{R}_2$ mit großer Wahrscheinlichkeit ausgerichtet wie dieses zusätzliche Elektron, so dass wir für dieses näherungsweise das Hüpfmatrixelement $t'_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_4} = -\sum_{\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4}/U$ erhalten.
e) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1$, $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_2$: Dieser Beitrag beschreibt einen Prozess, bei dem zwei Elektronen von $\mathbf{R}_2$ nach $\mathbf{R}_1$ springen. Er setzt also voraus, dass ein doppelt besetzter Gitterplatz neben einem unbesetzten liegt. Auch dies ist für großes $U$ ein unwahrscheinlicher Prozess.
f) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_2$, $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_1$: Dieser Beitrag liefert

$$\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) d_{s'}(\mathbf{R}_1)] \tag{22.22}$$

$$= \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1} \left( d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{s'}(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) - d_{s'}(\mathbf{R}_1) d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) e_s(\mathbf{R}_2) \right). \tag{22.23}$$

Wir bringen die explizite Auswertung.

$$\begin{aligned}
d_s^\dagger d_{s'} &= \delta_{s,s'} n_s n_{-s}, & (22.24)\\
e_s e_{s'}^\dagger &= \delta_{s,s'}(1-n_s)(1-n_{-s}), & (22.25)\\
d_{s'} d_s^\dagger &= \delta_{s,s'}(1-n_s)n_{-s} - \delta_{-s,s'} c_s^\dagger c_{-s}, & (22.26)\\
e_{s'}^\dagger e_s &= \delta_{s,s'} n_s(1-n_{-s}) + \delta_{-s,s'} c_{-s}^\dagger c_s. & (22.27)
\end{aligned}$$

Die $\delta_{-s,s'}$-Terme liefern

$$-\delta_{-s,s'} d_{s'}(\mathbf{R}_1) d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) e_s(\mathbf{R}_2) = c_s^\dagger(\mathbf{R}_1) c_{s'}(\mathbf{R}_1) c_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) c_s(\mathbf{R}_2) - \delta_{s,s'} n_s(\mathbf{R}_1) n_s(\mathbf{R}_2). \quad (22.28)$$

Nehmen wir diesen $\delta_{s,s'}$-Term mit den vorhergehenden zusammen, so folgt

$$\begin{aligned} & n_{s1}n_{-s1}(1-n_{s2})(1-n_{-s2}) - (1-n_{1s})n_{-s1}n_{s2}(1-n_{-s2}) - n_{s1}n_{s2} && (22.29)\\ = \; & n_{-s1}(1-n_{-s2})(n_{s1}-n_{s2}) - n_{s1}n_{s2} && (22.30)\\ = \; & n_{-s1}n_{s1} - n_{-s1}n_{s2} - n_{-s1}n_{s1}n_{-s2} + n_{-s1}n_{s2}n_{-s2} - n_{s1}n_{s2}. && (22.31)\end{aligned}$$

Beachten wir, dass bei Vertauschung der Orte 1 und 2 noch mal der gleiche Beitrag entsteht, so sehen wir, dass sich $n_{-s1}n_{s1}n_{-s2}$ und $n_{-s1}n_{s2}n_{-s2}$ wegheben. Es bleibt dann

$$n_{-s1}n_{s1} - n_{-s1}n_{s2} - n_{s1}n_{s2} = n_{-s1}n_{s1} - n_1 n_{s2} \quad (22.32)$$

so dass wir schließlich mit (22.19) den Beitrag

$$\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1} \sum_\alpha (2S^\alpha(\mathbf{R}_1)S^\alpha(\mathbf{R}_2) - \frac{1}{2}n(\mathbf{R}_1)n(\mathbf{R}_2) + 2n_\uparrow(\mathbf{R}_1)n_\downarrow(\mathbf{R}_1)) \quad (22.33)$$

erhalten. Bei halber Besetzung (nur dann ist der Spin an den Gitterplätzen von 0 verschieden) erhält man also einen antiferromagnetische Wechselwirkungs-Beitrag

$$H_{\mathrm{J}} = \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2} \frac{J_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2}}{2} \mathbf{S}(\mathbf{R}_1)\cdot\mathbf{S}(\mathbf{R}_2) \quad \text{mit} \quad J_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} = \frac{4t^2_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2}}{U}. \quad (22.34)$$

Betrachtet man ein exakt halb gefülltes Band, so hat man einen Antiferromagneten beschrieben durch $H_{\mathrm{J}}$ (siehe Abschnitt 14.b). Man beobachtet, dass jetzt die kritische Temperatur für den Antiferromagnetismus proportional $t^2/U$ ist, also mit wachsendem $U$ abfällt. Das hier durchgeführte Verfahren ist für starkes $U$ gut (strong-coupling limit), während das im vorhergehenden Abschnitt für kleine $U$ gut ist (weak-coupling limit). Im Bereich mittlerer Kopplung ist das Hubbard-Modell nur schwer zu behandeln.

Hat man etwas weniger oder mehr als halbe Füllung, so nimmt man $H_0$ hinzu. Man spricht dann vom $t$-$J$-Modell. Man kann auch noch die $t'$-Terme, die wir unter c) und d) kennengelernt haben, mitnehmen. Nahe an der halben Füllung können wir die Operatoren $e^\dagger$ und $e$ durch die entsprechenden Loch-Operatoren ersetzen

$$c_s^\dagger(\mathbf{R}) = s l_{-s}(\mathbf{R}), \quad c_s(\mathbf{R}) = s l_{-s}^\dagger(\mathbf{R}) \quad (22.35)$$

und erhalten dann den Beitrag

$$H_{\mathrm{t}'} = -\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t'_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} \left(d_s^\dagger(\mathbf{R}) d_s(\mathbf{R}') + l_s^\dagger(\mathbf{R}) l_s(\mathbf{R}')\right) \quad (22.36)$$

mit

$$t'_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} = -\frac{1}{U}\sum_{\mathbf{R}''} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}''} t_{\mathbf{R}''-\mathbf{R}'} \quad (22.37)$$

zum Hamilton-Operator. Man bezeichnet dies dann als das $t$-$t'$-$J$-Modell.