ハバードモデルのSlave boson平均場近似によるアプローチ

永井佑紀

平成19年8月2日

ある論文 [1] を読むために、Kotliar-Ruckenstein slave boson mean-field theory[2] を勉強したのでまとめた。具体的な計算はせず、ボソン場をどのように導入するか、何を行っているかだけを書いた。

1 Hubbard modelのHamiltonian

ハバードモデルのハミルトニアンは

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_i c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} c^\dagger_{i-\sigma} c_{i-\sigma} \tag{1}$$

である。ここでは $\sigma = \pm 1$ でありスピンアップとダウンを意味する。あるサイト i の状態はアップのみ、ダウンのみ、アップおよびダウン、両方なし、の四通りであり、それぞれを

$$|1,0\rangle \tag{2}$$
$$|0,-1\rangle \tag{3}$$
$$|1,-1\rangle \tag{4}$$
$$|0,0\rangle \tag{5}$$

と書くことにする。つまり、Fock空間はサイトあたり4次元である。また、これらは $|0,0\rangle \equiv |0\rangle$ とおけば[1]

$$c^\dagger_{i\uparrow}|0\rangle \tag{6}$$
$$c^\dagger_{i\downarrow}|0\rangle \tag{7}$$
$$c^\dagger_{i\downarrow} c^\dagger_{i\uparrow}|0\rangle \tag{8}$$
$$|0\rangle \tag{9}$$

と書ける。

2 Slave bosonの導入

次に、四つのbosonの生成（消滅）演算子：$e^\dagger_i(e_i)$、$p^\dagger_{i\sigma}(p_{i\sigma})$、$d^\dagger_i(d_i)$ を導入する。これらはそれぞれ、占有なし、スピン σ が占有、二重占有、の状態を生成（消滅）させる演算子である。これらの状態があるかないか、という $2 \times 2^2 = 16$ 通りの情報をもともとの状態に付け加えたものを表現する新たな大きなFock空間を用意する。このFock空間の次元は $4 \times 16 = 64$ 次元である。このときの状態は、たとえば、

$$|1,0;0,1,0,0\rangle = f^\dagger_{i\uparrow} p^\dagger_{i\uparrow}|\mathrm{vac}\rangle \tag{10}$$
$$|1,0;1,0,0,1\rangle = f^\dagger_{i\uparrow} e^\dagger_i d^\dagger_i|\mathrm{vac}\rangle \tag{11}$$

[1] i 番目のサイトには粒子がいない状態という意味で真空である。

というように表記できる[2]。ここで、この新しい Fock 空間での fermion の演算子を $f_{i\sigma}$ と書いた。上の状態は、「スピンアップひとつあり、スピンアップ占有状態あり」の状態である。下の状態は、「スピンアップひとつあり、占有なし状態あり、二重占有状態あり」の状態である。上の状態は物理的に問題はないが、下の状態は明らかに物理的な状態ではない。つまり、これらの付け加えた状態は物理的ではない状態を含む。そこで、拘束条件：

$$\sum_{\sigma} p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + e_i^{\dagger} e_i + d_i^{\dagger} d_i = 1 \tag{12}$$

$$f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} = p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + d_i^{\dagger} d_i \tag{13}$$

が必要となる。一番目の式は、新しい Fock 空間の状態は 64 通りもあるが実際に実現されるのはもともとの Fock 空間での 4 通りの状態しかないことを意味している。二番目の式は、fermion をカウントしたいときに実現している状態は、必ず一重占有か二重占有であるということを意味している。

3 新しい Fock 空間での Hamiltonian

この新しい大きな Fock 空間で、以前のハミルトニアンと等価な行列要素を与えるハミルトニアンの表現はどのようになるだろうか。この Fock 空間において物理的に許される状態は

$$|1,0;0,1,0,0\rangle = f_{i\uparrow}^{\dagger} p_{i\uparrow}^{\dagger} |\mathrm{vac}\rangle \tag{14}$$

$$|0,-1;0,0,1,0\rangle = f_{i\downarrow}^{\dagger} p_{i\downarrow}^{\dagger} |\mathrm{vac}\rangle \tag{15}$$

$$|1,-1;0,0,0,1\rangle = f_{i\uparrow}^{\dagger} f_{i\downarrow}^{\dagger} d_i^{\dagger} |\mathrm{vac}\rangle \tag{16}$$

$$|0,0;1,0,0,0\rangle = e_i^{\dagger} |\mathrm{vac}\rangle \tag{17}$$

の四つである。つまり、重要なのは、この四つの状態ベクトルに挟まれる行列要素であり、この四つの状態ベクトルに挟まれた行列要素が以前の四つの状態ベクトルに挟まれた行列要素と等しくなっていれば、目的のハミルトニアンが得られる。

たとえば、最初のハミルトニアンに存在した $c_{i\sigma}$ に相当する fermion の演算子 $f_{i\sigma}$ をある状態に作用させてみると

$$f_{i1} |1,0;0,1,0,0\rangle = |0,0;0,1,0,0\rangle \tag{18}$$

$$f_{i1} |1,-1;0,0,0,1\rangle = |0,-1;0,0,0,1\rangle \tag{19}$$

となる。作用させたあとの状態は、物理的な状態ではないことがわかる。物理的な状態にするためには、さらに

$$e_i^{\dagger} p_{i1} |0,0;0,1,0,0\rangle = |0,0;1,0,0,0\rangle \tag{20}$$

$$p_{i-1}^{\dagger} d_i |0,-1;0,0,0,1\rangle = |0,-1;0,0,1,0\rangle \tag{21}$$

のように boson の演算子を作用させなければならない。つまり、状態ベクトルが物理的であるためには、最初の fermion の演算子は

$$c_{i\sigma} \to (e_i^{\dagger} p_{i\sigma} + p_{i-\sigma}^{\dagger} d_i) f_{i\sigma} \tag{22}$$

のように置き換えなければならない。よって、新しい大きな Fock 空間におけるハミルトニアンは

$$\tilde{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} z_{i\sigma}^{\dagger} z_{j\sigma} + U \sum_i d_i^{\dagger} d_i \tag{23}$$

$$z_{i\sigma} = e_i^{\dagger} p_{i\sigma} + p_{i-\sigma}^{\dagger} d_i \tag{24}$$

となる。

[2] この Fock 空間での真空を $|\mathrm{vac}\rangle$ と置く。

3.0.1 新しい空間での演算子

この大きな Fock 空間では、粒子数演算子 $n_{i\sigma} = c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma}$ はどのように表現されるだろうか。もともとの Fock 空間では

$$
\begin{aligned}
n_{i\uparrow}|0,-1\rangle &= 0 &(25)\\
n_{i\uparrow}|1,0\rangle &= |1,0\rangle &(26)\\
n_{i\uparrow}|0,0\rangle &= 0 &(27)\\
n_{i\uparrow}|1,-1\rangle &= |1,-1\rangle &(28)
\end{aligned}
$$

であるから、新しい大きな Fock 空間では $c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} \to f^\dagger_{i\sigma} f_{i\sigma}$ とすれば問題がないことがわかる。これは、粒子数演算子が演算の前と後で同じ状態になっているからである。

大きな Fock 空間でもともとの演算子がどのように fermion と boson で表現されるかは、その演算子を物理的な状態に作用させたときにどのように状態が変化するかをみればわかる。

4 $U = 0$ の極限での整合性

演算子 $z_{i\sigma}$ は、大きな空間での物理的な状態でのハミルトニアンの行列要素がもともとのハミルトニアンの行列要素と等しくなるために必要であった boson の演算子である。しかしながら、実は演算子 $z_{i\sigma}$ は式 (24) で与えられる必要はない。ハミルトニアンの行列要素をそれぞれの空間で等しくする boson の演算子の選択には任意性があり、よくわかっている極限での状態を再現するような演算子を選択しなければならない。

まず、四つの boson の演算子を平均場で置き換えると

$$
\begin{aligned}
e_i \to \langle e_i\rangle &= e &(29)\\
p_{i\sigma} \to \langle p_{i\sigma}\rangle &= p_\sigma &(30)\\
d_i \to \langle d_i\rangle &= d &(31)
\end{aligned}
$$

となる。このとき拘束条件はサイト i ごとに対するものではなく、この平均場に対するものとなる。また、粒子数演算子も平均値に置き換えると

$$n_i \to \langle n_i\rangle = n \tag{32}$$

となる。各サイトに平均して電子が一つ入っている状況で $(n = 1)$、$U = 0$ という極限を考えてみる。このとき、四つの物理的状態は均等に実現されているはずなので[3]

$$e^2 = d^2 = p_\sigma^2 = \frac{1}{4} \tag{33}$$

となっているはずである。

ここで $z_{i\sigma}$ の意味について考えてみる。式 (23) を眺めると、$z_{i\sigma}$ はホッピングパラメータ t_{ij} の大きさを変更する役割を持っていることがわかる。つまり、t_{ij} が繰り込まれて $t_{ij} \to t_{ij} z^\dagger_{i\sigma} z_{j\sigma} \equiv \tilde{t_{ij}}$ となっている。このような繰り込みがなぜ起こるかというと、電子間の相互作用が存在するからである。逆にいえば、ハバードモデルの第一項のみしかない $(U = 0)$ 電子のホッピングのみが存在する系では、繰り込みは起こらず $t_{ij} = \tilde{t_{ij}}$ となっていなければ物理的におかしい。しかし、式 (24) で定義された $z_{i\sigma}$ を用いて平均場近似をすると、

$$\langle z^\dagger_{i,\sigma} z_{j\sigma}\rangle = \frac{1}{4} \tag{34}$$

となってしまい、$t_{ij} \neq \tilde{t_{ij}}$ となってしまう。そこで、Kotliar and Ruckenstein は

$$
\begin{aligned}
\tilde{z}_{i\sigma} &= (1 - f^\dagger_{i\sigma} f_{i\sigma})^{-1/2} z_{i\sigma} (f^\dagger_{i\sigma} f_{i\sigma})^{-1/2} &(35)\\
&= (1 - d^\dagger_i d_i - p^\dagger_{i\sigma} p_{i\sigma})^{-1/2} z_{i\sigma} (1 - e^\dagger_i e_i - p^\dagger_{i-\sigma} p_{i-\sigma})^{-1/2} &(36)
\end{aligned}
$$

[3] きっちりつまる必要もないし、スピンもどっちを向いていてもかまわない。

という新しい z を導入した。この $\tilde{z}_{i\sigma}$ が $z_{i\sigma}$ と同じ固有値固有ベクトルを持っているかどうかは、私には確かめられなかったが、平均場近似をした場合には

$$\langle \tilde{z}^{\dagger}_{i,\sigma} \tilde{z}_{j\sigma} \rangle = 1 \tag{37}$$

となることは確かめることができた。このような繰り込み因子を用いることで、ハバードモデルを slave boson mean field で扱えるようになるのである。

参考文献

[1] A. Ruegg, S. Pilgram and M. Sigrist, Phys. Rev. B **75**, 195117 (2007).

[2] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362, (1986).