HubbardモデルのRPA

永井佑紀

平成24年3月23日

Hubbardモデルにおける RPA を、ファインマンダイヤグラムを使わずに導出してみる。特に、RPA による電荷感受率とスピン感受率を導出する。

1 Hubbardモデル

Hubbardモデルのハミルトニアンを

$$H = H_0 + H_{int} \tag{1}$$
$$H_0 = \sum_{\langle ij\rangle\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \mu)\hat{n}_{i\sigma}, \tag{2}$$
$$H_{int} = \sum_i U_{ii}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} + \frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\sum_{\sigma\sigma'} U_{ij}\hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{j\sigma'} \tag{3}$$

と書く。ここで、$\langle ij\rangle$ はホッピング要素が有限のものを取るという意味であり、$n_{i\sigma} = c^\dagger_{i\sigma}c_{i\sigma}$ である。

H_0 は並進対称性を持つと仮定し、$\epsilon_i = 0$ とすると、

$$H_0 = \sum_{\langle ij\rangle\sigma} (t_{ij} - \mu\delta_{ij}) c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \tag{4}$$
$$= \sum_{i\sigma}\sum_{\delta} (t_\delta - \mu\delta_{\delta 0}) c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \tag{5}$$

となる。ここで一様系なのでホッピング項は場所に依らないので $j = i + \delta$ とした。演算子のフーリエ変換を

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{L}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{6}$$

と定義する[1]。このとき、

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} \tag{7}$$

となる。このときのエネルギー分散 ϵ_k は

$$\epsilon_k \equiv \sum_{\delta} (t_\delta - \mu\delta_{0\delta}) e^{-ik\delta} \tag{8}$$

で定義されている。

相互作用項 H_{int} も見通しをよくするために変形する。その際、U_{ii} や U_{ij} は並進対称性を持っていると仮定すると

$$\sum_i U_{ii}\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} = U\sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} \tag{9}$$
$$\frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle}\sum_{\sigma\sigma'} U_{ij}\hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{j\sigma'} = \frac{1}{2}\sum_{i\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0} U_\delta \hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{i+\delta\sigma'} \tag{10}$$

[1] L は系の体積であるとする。また、この以後は $\boldsymbol{k}\to k$, $\boldsymbol{r}_i \to r_i$ とする

となる。まず、オンサイト項は

$$
\begin{aligned}
U\sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} &= U\sum_i c^\dagger_{i\uparrow}c_{i\uparrow}c^\dagger_{i\downarrow}c_{i\downarrow} && (11)\\
&= U\sum_i \sum_{k_1,k_2,k_3,k_4} \frac{1}{L^4} e^{ik_1r_i}e^{-ik_2r_i}e^{ik_3r_i}e^{-ik_4r_i} c^\dagger_{k_1\uparrow}c_{k_2\uparrow}c^\dagger_{k_3\downarrow}c_{k_4\downarrow} && (12)\\
&= U\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4} \frac{1}{L^3}\delta(k_1-k_2+k_3-k_4) c^\dagger_{k_1\uparrow}c_{k_2\uparrow}c^\dagger_{k_3\downarrow}c_{k_4\downarrow} && (13)\\
&= U\sum_{k_2,k_3,k_4} \frac{1}{L^3} c^\dagger_{k_2-k_3+k_4\uparrow}c_{k_2\uparrow}c^\dagger_{k_3\downarrow}c_{k_4\downarrow} && (14)\\
&= U\sum_{k_2,q,k_4} \frac{1}{L^3} c^\dagger_{k_2+q\uparrow}c_{k_2\uparrow}c^\dagger_{k_4-q\downarrow}c_{k_4\downarrow} && (15)\\
&= \frac{U}{L}\sum_q \frac{1}{L}\sum_{k_2} c^\dagger_{k_2+q\uparrow}c_{k_2\uparrow}\frac{1}{L}\sum_{k_4} c^\dagger_{k_4-q\downarrow}c_{k_4\downarrow} && (16)\\
&= \frac{U}{L}\sum_q \rho_\uparrow(q)\rho_\downarrow(-q) && (17)
\end{aligned}
$$

となる。ここで、

$$
\rho_\sigma(q) \equiv \frac{1}{L}\sum_k c^\dagger_{k+q\sigma}c_{k\sigma} \tag{18}
$$

を用いた。さらに、電荷密度演算子 $\rho_c(q)$ とスピン密度演算子 $\rho_c(q)$：

$$
\begin{aligned}
\rho_c(q) &\equiv \rho_\uparrow(q) + \rho_\downarrow(q) && (19)\\
\rho_s(q) &\equiv \rho_\uparrow(q) - \rho_\downarrow(q) && (20)
\end{aligned}
$$

を導入すると

$$
\begin{aligned}
\frac{U}{L}\sum_q \rho_\uparrow(q)\rho_\downarrow(-q) &= \frac{U}{L}\sum_q \frac{\rho_c(q)+\rho_s(q)}{2}\frac{\rho_c(-q)-\rho_s(-q)}{2} && (21)\\
&= \frac{U}{4L}\sum_q \left[\rho_c(q)\rho_c(-q) - \rho_c(q)\rho_s(-q) + \rho_s(q)\rho_c(-q) - \rho_s(q)\rho_s(-q)\right] && (22)\\
&= \frac{U}{4L}\sum_q \left[\rho_c(q)\rho_c(-q) - \rho_s(q)\rho_s(-q)\right] && (23)
\end{aligned}
$$

となる[2]。

[2]第二項と第三項は変数 q の入れ替えを用いるとキャンセルする。

次に、相互作用項第二項は

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}\sum_{i\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0}U_\delta \hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{i+\delta\sigma'} &= \frac{1}{2}\sum_{i\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0}U_\delta c^\dagger_{i\sigma}c_{i\sigma}c^\dagger_{i+\delta\sigma'}c_{i+\delta\sigma'} && (24)\\
&= \sum_{i\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\frac{1}{L^4}e^{ik_1r_i}e^{-ik_2r_i}e^{ik_3(r_i+r_\delta)}e^{-ik_4(r_i+r_\delta)}U_\delta c^\dagger_{k_1\sigma}c_{k_2\sigma}c^\dagger_{k_3\sigma'}c_{k_4\sigma'} && (25)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0}\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4}\delta(k_1-k_2+k_3-k_4)\frac{1}{L^3}e^{i(k_3-k_4)r_\delta}U_\delta c^\dagger_{k_1\sigma}c_{k_2\sigma}c^\dagger_{k_3\sigma'}c_{k_4\sigma'} && (26)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0}\sum_{k_2,k_3,k_4}\frac{1}{L^3}e^{i(k_3-k_4)r_\delta}U_\delta c^\dagger_{2-k_3+k_4\sigma}c_{k_2\sigma}c^\dagger_{k_3\sigma'}c_{k_4\sigma'} && (27)\\
&= \frac{1}{2L}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0}\sum_{k_2,q,k_4}\frac{1}{L^2}e^{-iqr_\delta}U_\delta c^\dagger_{k_2+q\sigma}c_{k_2\sigma}c^\dagger_{k_4-q\sigma'}c_{k_4\sigma'} && (28)\\
&= \frac{1}{2L}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\delta\neq 0}\sum_{q}e^{-iqr_\delta}U_\delta\rho_\sigma(q)\rho_{\sigma'}(-q) && (29)\\
&= \frac{1}{2L}\sum_{q}U(q)\sum_{\sigma\sigma'}\rho_\sigma(q)\rho_{\sigma'}(-q) && (30)\\
&= \frac{1}{2L}\sum_{q}U(q)\rho_c(q)\rho_c(-q) && (31)
\end{aligned}
$$

となる。ここで、

$$U(q)\equiv\sum_{\delta\neq 0}e^{-iqr_\delta}U_\delta \tag{32}$$

を定義した。さらに、

$$
\begin{aligned}
\sum_{\sigma\sigma'}\rho_\sigma(q)\rho_{\sigma'}(-q) &= \rho_\uparrow(q)\rho_\uparrow(-q)+\rho_\uparrow(q)\rho_\downarrow(-q)+\rho_\downarrow(q)\rho_\uparrow(-q)+\rho_\downarrow(q)\rho_\downarrow(-q) && (33)\\
&= \frac{1}{4}\left(\rho_c(q)\rho_c(-q)+\rho_c(q)\rho_s(-q)+\rho_s(q)\rho_c(-q)+\rho_s(q)\rho_s(-q)\right)\\
&+\frac{1}{4}\left(\rho_c(q)\rho_c(-q)-\rho_s(q)\rho_s(-q)\right)+\frac{1}{4}\left(\rho_c(q)\rho_c(-q)-\rho_s(q)\rho_s(-q)\right)\\
&+\frac{1}{4}\left(\rho_c(q)\rho_c(-q)-\rho_c(q)\rho_s(-q)-\rho_s(q)\rho_c(-q)+\rho_s(q)\rho_s(-q)\right) && (34)\\
&= \rho_c(q)\rho_c(-q) && (35)
\end{aligned}
$$

を用いている。以上から、相互作用項を

$$
\begin{aligned}
H_{int} &= H_c + H_s && (36)\\
H_c &= \frac{1}{2L}\sum_q\left(U(q)+\frac{1}{2}U\right)\rho_c(q)\rho_c(-q) && (37)\\
H_s &= -\frac{U}{4L}\sum_q\rho_s(q)\rho_s(-q) && (38)
\end{aligned}
$$

という、電荷密度演算子とスピン密度演算子を使って書き換えた形にすることができた。

2 平均場近似

次に、書き換えた相互作用項に平均場近似をほどこす。電荷密度演算子とスピン密度演算子を、

$$
\begin{aligned}
\rho_c(q) &= \langle\rho_c(q)\rangle-(\langle\rho_c(q)\rangle-\rho_c(q)) && (39)\\
\rho_s(q) &= \langle\rho_s(q)\rangle-(\langle\rho_s(q)\rangle-\rho_s(q)) && (40)
\end{aligned}
$$

という、平均値とそれからの揺らぎで書き表す。この表式を代入して、揺らぎの二次を無視すると

$$H_c \sim \frac{1}{2L}\sum_q \left(U(q)+\frac{1}{2}U\right)(\langle\rho_c(q)\rangle\langle\rho_c(-q)\rangle - \langle\rho_c(q)\rangle(\langle\rho_c(-q)\rangle - \rho_c(-q)) - (\langle\rho_c(q)\rangle - \rho_c(q))\langle\rho_c(-q)\rangle) \quad (41)$$

$$= \frac{1}{2L}\sum_q \left(U(q)+\frac{1}{2}U\right)(-\langle\rho_c(q)\rangle\langle\rho_c(-q)\rangle + \langle\rho_c(q)\rangle\rho_c(-q) + \rho_c(q)\langle\rho_c(-q)\rangle) \quad (42)$$

$$= \frac{1}{2L}\sum_q \left(U(q)+\frac{1}{2}U\right)[\langle\rho_c(q)\rangle\rho_c(-q) + \langle\rho_c(-q)\rangle\rho_c(q)] \quad (43)$$

$$= \frac{1}{L}\sum_q \left(U(q)+\frac{1}{2}U\right)\langle\rho_c(q)\rangle\rho_c(-q) \quad (44)$$

$$= \frac{1}{L}\sum_q U_c(q)\langle\rho_c(q)\rangle\rho_c(-q) \quad (45)$$

$$H_s \sim -\frac{U}{4L}\sum_q [\langle\rho_s(q)\rangle\rho_s(-q) + \langle\rho_s(-q)\rangle\rho_s(q)] \quad (46)$$

$$= -\frac{U}{2L}\sum_q \langle\rho_s(q)\rangle\rho_s(-q) \quad (47)$$

となる。ここで

$$U_c(q) \equiv U(q) + \frac{1}{2}U \quad (48)$$

を定義した。

3　線型応答

さて、ここで、線型応答理論を使って、電荷感受率とスピン感受率を求めてみることにする。線型応答理論によれば、外場 $H'(t)$

$$H'(t) = -Ae^{-i\omega t} \quad (49)$$

が存在するとき、この外場に誘起される演算子 B の期待値 $\langle B\rangle$ は

$$\langle B\rangle = B(\omega)e^{-i\omega t} \quad (50)$$

$$B(\omega) \equiv \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dte^{i\omega t}\langle[B(t),A]\rangle \quad (51)$$

である。これを使って RPA(Random Phase Approximation) の感受率を求める。

3.1　スピン感受率

動的なスピン感受率とは、時間に依存するある摂動 $h_i e^{-i\omega t}$ を与えたときに、どの程度磁化が出るかという量である。したがって、z 方向の磁化に対する動的スピン感受率は $\chi_s(q,\omega)$ は

$$\langle\rho_s(q,\omega)\rangle = \lim_{h\to 0}\chi_s(q,\omega)h \quad (52)$$

と書けるはずである。

H_s を見ればわかるように、$\langle\rho_s(q)\rangle$ を誘起する外場は $\rho_s(-q)$ である。よってハミルトニアンに H_s のほかに微小な外場を導入し、

$$H = H_0 + H_c - \frac{U}{2}\langle\rho_s(q)\rangle\rho_s(-q) + h\rho_s(-q)e^{-i\omega t} \quad (53)$$

とする。このとき、線型応答理論により、

$$\langle \rho_s(q) \rangle = \langle \rho_s(q,\omega) \rangle e^{-i\omega t} \tag{54}$$

なので、

$$H = H_0 + H_c - \frac{U}{2}\langle \rho_s(q,\omega) \rangle \rho_s(-q) e^{-i\omega t} + h\rho_s(-q)e^{-i\omega t} \tag{55}$$

と書く事ができ、

$$\langle \rho_s(q,\omega) \rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt e^{i\omega t}\langle \left[\rho_s(q,t), -\frac{U}{2}\langle \rho_s(q,\omega) \rangle \rho_s(-q) + h\rho_s(-q)\right] \rangle \tag{56}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt e^{i\omega t}\langle [\rho_s(q,t), \rho_s(-q)] \rangle \left(-\frac{U}{2}\langle \rho_s(q,\omega) \rangle + h\right) \tag{57}$$

となる。ここで、摂動を与える前にはスピンに関する期待値がゼロであったとすると、$H_0 + H_c$ をハミルトニアンとして得られるスピン感受率を

$$\chi_0(q,t) \equiv -\frac{i}{\hbar}\langle [\rho_s(q,t), \rho_s(-q)] \rangle \tag{58}$$

と定義する事により、

$$\langle \rho_s(q,\omega) \rangle = \int_0^\infty dt e^{i\omega t}\chi_0(q,t)\left(-\frac{U}{2}\langle \rho_s(q,\omega) \rangle + h\right) \tag{59}$$

$$= \chi_0(q,\omega)\left(-\frac{U}{2}\langle \rho_s(q,\omega) \rangle + h\right) \tag{60}$$

が得られ、式を整理すると、

$$\langle \rho_s(q,\omega) \rangle = h\frac{\chi_0(q,\omega)}{1+\frac{U}{2}\chi_0(q,\omega)} \tag{61}$$

となる。式 (63) と比べる事で、

$$\chi_s(q,\omega) = \frac{\chi_0(q,\omega)}{1+\frac{U}{2}\chi_0(q,\omega)} \tag{62}$$

となる。

3.2 電荷感受率

電荷感受率もスピン感受率の計算と同様に行うことができる。動的な電荷感受率は

$$\langle \rho_c(q,\omega) \rangle = \lim_{h\to 0}\chi_c(q,\omega)h \tag{63}$$

と書く事ができて、$\langle \rho_c(q) \rangle$ を誘起する外場は $\rho_c(-q)$ である。よって、RPA における電荷感受率は

$$\chi_c(q,\omega) = \frac{\chi_0(q,\omega)}{1-U_c(q)\chi_0(q,\omega)} \tag{64}$$

となる。このときの $\chi_0(q,\omega)$ は、$H_0 + H_s$ をハミルトニアンとして得られるものである。

とくに、オンサイト相互作用のみを考えた場合には、

$$\chi_c^{onsite}(q,\omega) = \frac{\chi_0(q,\omega)}{1-\frac{U}{2}\chi_0(q,\omega)} \tag{65}$$

となる。

参考文献

G. D. Mahan, “Many-Particle Physics” 3rd Ed. p. 404