数理解析研究所講究録
第 1961 巻 2015 年 12-16

電子-格子相互作用系における基底状態の性質について

北海道大学・理学部数学科　宮尾　忠宏
Tadahiro Miyao
Department of Mathematics, Hokkaido University

Abstract

電子格子相互作用を記述する典型的な模型の一つである，Holstein-Hubbard 模型の基底状態に関する最近の厳密な結果 [10] を概説する．

1　背景

電子と格子の相互作用は様々な興味深い物理現象を引き起こす．例えば，電子はクーロン斥力で反発しあうが，電子格子相互作用を通じてペアを作る．その結果，超伝導または電荷密度波が生じる [1]．このように，電子格子系は物理的に重要な研究対象であるにも関わらず，数理物理学的な研究の数は多くはない．

1.1　Holstein model に関する結果： Löwen の定理

我々の結果の意義を理解するために，関連する過去の結果を概説する．まずは，Holstein 模型 [4] に関する Löwen の結果について触れよう．Holstein 模型とは次のハミルトニアンで与えられる：

Holstein model

$$H_{\mathrm{H}}=-\sum_{x,y\in\Lambda}\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}t(x-y)c_{x\sigma}^{*}c_{y\sigma}+\sum_{x\in\Lambda}g(x-y)n_{x}(b_{y}+b_{y}^{*})+\sum_{x\in\Lambda}b_{x}^{*}b_{x}$$

H_{H} の第 1 項は電子の hopping を表す項であり，第 2 項は電子格子間相互作用を記述する．第 3 項はフォノンのエネルギーを表す．記号の定義を説明をしよう．考えている系は $\Lambda=[-L,L)^{d}\cap\mathbb{Z}^{d}$ 上の電子格子系である．ハミルトニアン H_{H} はヒルベルト空間

$$\mathfrak{E}\otimes\mathfrak{P}$$

に作用している．ここで，電子の住んでいるヒルベルト空間は

$$\mathfrak{E}=\mathfrak{F}_{e}\otimes\mathfrak{F}_{e},\qquad \mathfrak{F}_{e}=\bigoplus_{n=0}^{|\Lambda|}\wedge^{n}\ell^{2}(\Lambda)$$

で与えられる．$\wedge^n$ は n 重反対称テンソル積である．フォノンはボゾン・フォック空間

$$\mathfrak{P} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \otimes_{\mathrm{s}}^n \ell^2(\Lambda)$$

に住んでいる．$c_{x\sigma}^*, c_{x\sigma}$ は電子の生成・消滅作用素であり，反交換関係

$$\{c_{x\sigma}, c_{y\sigma'}^*\} = \delta_{xy}\delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{c_{x\sigma}, c_{y\sigma'}\} = 0$$

を満たす．電子の個数作用素は

$$n_x = n_{x\uparrow} + n_{x\downarrow}, \quad n_{x\sigma} = c_{x\sigma}^* c_{x\sigma}$$

で定義される．b_x^*, b_x はフォノンの生成・消滅作用素であり，次の交換関係を満たしている：

$$[b_x, b_y^*] = \delta_{xy}, \quad [b_x, b_y] = 0.$$

$t(x-y)$ は電子の hopping の係数であり，電子がサイト x から y へ跳ぶ遷移振幅を表している．本稿では以下の仮定を置く：

(T. 1) $t(x) \in \mathbb{R},\ t(-x) = t(x)\ \forall x \in \mathbb{Z}^d$.

(T. 2) (再隣接相互作用) $\|x\| > 1$ のとき，$t(x) = 0$. ここで，$\|x\| = |x_1| + \cdots + |x_d|$.

(T. 3) (connectivity) $t(x) \neq 0\ \forall x \in \mathbb{Z}^d,\ \ \|x\| = 1$.

$g(x-y)$ はサイト x と y の間の電子格子間の相互作用の強さを表す係数である．以下の仮定を置く：

(G. 1) $g(x) \in \mathbb{R},\ g(-x) = g(x)\ \forall x \in \mathbb{Z}^d$.

以上の仮定の下で，H_{H} は下に有界な自己共役作用素であることが，Kato-Rellich の定理からわかる．

この系は電子数を保存する，つまり，H_{H} と $N_{\mathrm{e}} = \sum_{x\in\Lambda} n_x$ は（強）可換なので，次の分解を得る：

$$H_{\mathrm{H}} = \bigoplus_{N=0}^{2|\Lambda|} H_{\mathrm{H},N}, \quad H_{\mathrm{H},N} = H_{\mathrm{H}} \restriction \mathfrak{E}_N \otimes \mathfrak{P},$$

$$\mathfrak{E} \otimes \mathfrak{P} = \bigoplus_{N=0}^{2|\Lambda|} \mathfrak{E}_N \otimes \mathfrak{P}, \quad \mathfrak{E}_N \otimes \mathfrak{P} = \ker(N_{\mathrm{e}} - N).$$

$\mathfrak{E}_N \otimes \mathfrak{P}$ を N 電子空間と呼ぶ．$H_{\mathrm{H},N}$ は電子が N 個ある系を記述するハミルトニアンである．

Theorem 1.1 (Löwen [7]) *1* 電子ハミルトニアン $H_{\mathrm{H},N=1}$ の基底状態はただ一つである．

Remark 1.2 (i) Löwen は [7] において，さらに次の事実を証明した：$\Lambda = \mathbb{Z}^d$, $g(x) = g\delta_{x0}$ のとき，基底状態エネルギー E_g は結合の強さ g に関して解析的である．このことから，(量子) 相転移の非存在がわかる．

(ii) 定理の証明は J. Fröhlich[3] の方法を拡張する．

1.2 Holstein model に関する結果：Freericks-Lieb の定理

Löwen の定理は，電子数が $N=1$ のときのみ成立する．強相関電子系における問題意識は，多数の電子が互いに相互作用する場合にどのような興味深い現象が起こるかということである．この観点からすると，Löwen の結果が多電子系に拡張できるかどうかは興味深い．Freericks-Lieb は，電子数が $2N$ のときに基底状態が一意的であることを証明し，更にその基底状態の磁気的な性質を明らかにした．この結果を解説しよう．そのために $M=0$ 部分空間を導入する．

まず，全スピン作用素 $\mathbf{S}^2$ を以下で定義する：

$$\mathbf{S}^2 = S^{(z)2} + \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+).$$

ここで，

$$\begin{aligned} S_+ &= \sum_{x\in\Lambda} S_{x+}, \quad S_{x+} = c_{x\uparrow}^* c_{x\downarrow}, \\ S_- &= \sum_{x\in\Lambda} S_{x-}, \quad S_{x-} = c_{x\downarrow}^* c_{x\uparrow}, \\ S^{(z)} &= \frac{1}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow), \quad N_\sigma = \sum_{x\in\Lambda} n_{x\sigma}. \end{aligned}$$

電子数が $2N$ のヒルベルト空間は $\mathfrak{E}_{2N}\otimes\mathfrak{P}$ で与えられる．$M=0$ **部分空間**とは

$$\mathfrak{X}_{2N} = \ker(S^{(z)}) \cap \mathfrak{E}_{2N}\otimes\mathfrak{P}$$

で定義される．

Theorem 1.3 (Freericks-Lieb[2]) 各 N に対して，$H_{\mathrm{H}} \restriction \mathfrak{X}_{2N}$ の基底状態はただ一つであり，$\langle\psi, \mathbf{S}^2\psi\rangle = 0$ をみたす．

Remark 1.4 (i) 様々な模型に対しても，この定理は拡張可能である [2].

(ii) 証明は Spin reflection positivity[6] の拡張である．

2 主結果

強相関電子系の数理物理学的研究における，最重要問題の一つに，強磁性の問題が挙げられる．強磁性の起源は，多体電子系における次の 2 つの特性によると考えられている：

(1) 電子はパウリの排他律に従う．

(2) クーロン相互作用（電子間相互作用）．

これらの特性を取り入れた最も単純な模型がハバード模型である [5]．ハバード模型の数理物理学的な研究はこれまでに活発に行われてきが，強磁性を説明できる（満足できるような）理論は未だに出来ていない[1]．この例からわかるように，電子間相互作用は強相関電子系において最も重要なファクターの一つである．しかしながら，Freericks-Lieb の定理は電子間相互作用を考慮していない．そこで,「Freericks-Lieb の定理は電子間相互作用を考慮するとどのようになるか？」と

[1] この辺の背景は，[11] に優れた解説がある．

問うのは自然である．まずは，電子格子相互作用系に電子間相互作用を加えた模型として，拡張 Holstein-Hubbard 模型を導入しよう．

(Extended) Holstein-Hubbard model

$$
\begin{aligned}
H = &- \sum_{x,y\in\Lambda} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t(x-y) c_{x\sigma}^* c_{y\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{x,y\in\Lambda} U(x-y)(n_x - \mathbb{1})(n_y - \mathbb{1}) \\
&+ \sum_{x,y\in\Lambda} g(x-y) n_x (b_y + b_y^*) + \sum_{x\in\Lambda} b_x^* b_x
\end{aligned}
$$

第 2 項が電子間相互作用を記述する．実数値関数 $U(x)$ はクーロン相互作用の強さを表す．我々は half-filling の場合について考察する．従って，考える状態のヒルベルト空間は

$$\mathfrak{E}_{N=|\Lambda|} \otimes \mathfrak{P}$$

である．M-**部分空間**とは

$$\mathfrak{H}_M = \ker(S^{(z)} - M) \cap \mathfrak{E}_{N=|\Lambda|} \otimes \mathfrak{P}, \quad M \in \{-|\Lambda|/2, -|\Lambda|/2 - 1, \dots, |\Lambda|/2\}$$

で定義される．

クーロン相互作用に関して，以下の仮定を置く：

(U. 1) $U(-x) = U(x)$.

有効クーロン相互作用の強さを

$$U_{\text{eff}}(x-y) = U(x-y) - 2\sum_{z\in\Lambda} g(x-z) g(y-z)$$

で定義する．我々の主定理を述べるために，さらに次の仮定を置く：

(U. 2) $\forall \xi = \{\xi_x\}_{x\in\Lambda} \in \mathbb{C}^{|\Lambda|}, \quad \sum_{x,y\in\Lambda} U_{\text{eff}}(x-y) \xi_x^* \xi_y > 0.$

Theorem 2.1 (Miyao [10]) 各 $M \in \{-|\Lambda|/2, \dots, |\Lambda|/2\}$ に対して，$H \restriction \mathfrak{H}_M$ の基底状態はただ一つである．それを ψ_M と書こう．このとき次が成り立つ：

$$\langle \psi_M, S_{x+} S_{y-} \psi_M \rangle \begin{cases} > 0 & \textit{if } x, y \in \Lambda_e \textit{ or } x, y \in \Lambda_o \\ < 0 & \textit{otherwise} \end{cases} \tag{1}$$

ここで，

$$
\begin{aligned}
\Lambda_e &= \{x = (x_1, \dots, x_d) \in \Lambda \,|\, x_1 + \cdots + x_d : \textit{even}\}, \\
\Lambda_o &= \{x = (x_1, \dots, x_d) \in \Lambda \,|\, x_1 + \cdots + x_d : \textit{odd}\}.
\end{aligned}
$$

Remark 2.2 (i) $U(x) = U_0 \delta_{xo}, g(x) = g_0 \delta_{xo}$ の場合 (通常の Holstein-Hubbard model)，**(U. 2)** は $|g_0| < \sqrt{U_0/2}$ となる．尚，$|g_0| \geq \sqrt{U_0/2}$ のとき，基底状態の性質はどうなるかという問題は未解決である．

(ii) ここでの方法は，電子とボソンが相互作用するような 様々な模型に対して拡張可能である．例：SSH model[8]，量子電磁場と相互作用する Hubbard model[9] etc..

(iii) (1) は基底状態が反強磁性的なスピン配位になることを意味する．[6] の結果と比較せよ．

(iv) [10] において，電荷感受率の上界を導出している．これは，(1) の有限温度版と見做せる．

References

[1] A. Altland, B. D. Simons, "*Condensed Matter Field Theory*", Cambridge University Press, 2010.

[2] J. K. Freericks, E. H. Lieb, Ground state of a general electron-phonon Hamiltonian is a spin singlet, Phys. Rev. B 51 (1995), 2812-2821.

[3] J. Fröhlich, On the infrared problem in a model of scalar electrons and massless, scalar bosons, Ann. Inst. H. Poincaré Sect. A (N.S.) 19 (1973), 1-103.

[4] T. Holstein, Studies of polaron motion : Part I. The molecular-crystal model, Ann. Phys. 8 (1959), 325-342.

[5] J. Hubbard, Electron correlation in narrow energy bands, Proc. Roy. Soc. (London) A 276 (1963), 238-257.

[6] E. H. Lieb, Two theorems on the Hubbard model, Phys. Rev. Lett. 62 (1989), 1201-1204.

[7] H. Löwen, Absence of phase transitions in Holstein systems, Phys. Rev. B 37 (1988), 8661-8667.

[8] T. Miyao, Ground state properties of the SSH model, J. Stat. Phys. 149 (2012), 519-550.

[9] T. Miyao, Upper bounds on the charge susceptibility of many-electron systems coupled to the quantized radiation field, arXiv:1405.0112.

[10] T. Miyao, Some rigorous results on the Holstein-Hubbard model, arXiv:1402.5202

[11] H. Tasaki, From Nagaoka's Ferromagnetism to Flat-Band Ferromagnetism and Beyond : An Introduction to Ferromagnetism in the Hubbard Model, Progr. Theoret. Phys. 99 (1998), 489-548.