

Sign problem, complex wave function and the Hubbard model

九大理 井町昌弘 佐賀大理工 米山博志

酸化物高温超伝導体のプロトタイプとしての2次元ハバード模型は、half-fillingで反強磁性ハイゼンベルグ模型と等価であるが、dopingを行ったときに生ずる量子状態に関連して、様々の状態が提案されている。例えばカイラルスピン液体、RVB、フラックス相等など。これらの議論は基本的に平均場の理論に基づいており、量子的揺らぎに対して真に安定かどうか興味がある。モンテカルロシミュレーションの方法は、このような問題に対して原理的に摂動を越えた計算を可能にすると考えられる。ここでは、カイラルスピン秩序 χ SO やフラックス相等の性質を調べるべく、2次元ハバード模型を複素試行関数を用いて計算を行う。ここで用いる方法は、基底状態での様々の物理量の期待値を計算するために、試行関数を用いて β が大きいところで期待値を評価する方法を取る。

ハバード模型のハミルトニアンは次のように表される。

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

ここで $c_{i\sigma}$ ($c_{i\sigma}^\dagger$) はサイト i でのスピン σ ($\sigma =$ 上向き または 下向き) の電子の消滅 (生成) 演算子で、 $n_{i\sigma}$ は i でのスピン σ の電子の数演算子である。第一項は電子の最近接格子点間のホッピングを表し、第二項はクーロン斥力を示している $U(> 0)$ 。

物理量 O の期待値は

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \Phi | O \exp(-\beta H) | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \exp(-\beta H) | \Phi \rangle}$$

と与えられる。これを量子モンテカルロ法を用いて計算するが、ハミルトニアンの第二項は、離散型のハバード-ストラトノビチ (H-S) 変数を導入して3次元の系に書き直し、この H-S 変数に関して importance sampling を行う。ここで、試行状態 $|\Phi_\sigma\rangle$ としては

$$|\Phi_\sigma\rangle = \prod_m \left(\sum_i^{M_j, N} (\phi_\sigma)_{mi} c_{i\sigma}^\dagger \right) |0\rangle$$

なる一粒子的な基底を選び、 $(\phi_\sigma)_{mi}$ として自由粒子の複素波動関数を試行関数として用いる。但し、 N はサイトの数であり、 M_f はスピン σ の電子の数を表す (half-filling は $N = 2M_f$)。 m はここでは運動量を区別する。

ハミルトニアンには、粒子ホール変換 (p-h 変換) に対する対称性 $c_{i\sigma}^\dagger \rightarrow \eta^i d_{i-\sigma}$ ($\eta^i = (-1)^i$) があるが、half-filling の場合にグリーン関数がどのように変換されるか見てみる。簡単の為に、一次元4サイトの系で考える ($N = 4, M_f = 2$)。このとき、half-filling は、スピン上向きの粒子2個と下向き2個に対応するが、スピン σ の2粒子状態を

$$c_{m_1\sigma}^\dagger c_{m_2\sigma}^\dagger |0\rangle = \sum_{j_1 j_2} \phi_{m_1 j_1} \phi_{m_2 j_2} c_{j_1\sigma}^\dagger c_{j_2\sigma}^\dagger |0\rangle$$

とすると、p-h 変換によって

$$\sum_{j_3 j_4 m_3 m_4} \phi_{m_3 j_3}^* \phi_{m_4 j_4}^* \eta_{j_4} \varepsilon_{m_1 m_2 m_3 m_4} d_{j_3-\sigma}^\dagger d_{j_4-\sigma}^\dagger |\tilde{0}\rangle$$

と変換される。このことは、p-h 変換は (i) c^\dagger を d^\dagger に、(ii) σ を $-\sigma$ に、そして、(iii) ϕ_{mj} を $\tilde{\phi}_{\bar{m}j}^* = \phi_{\bar{m}j}^* \eta_j$ に変換することを意味している。但し \bar{m} は m の補集合を表す。そこで、 $\{\phi_{\bar{m}j} \eta_j\}$ が $\{\phi_{mj}\}$ と一致するような波動関数の選択をしたとき、つまり、ホールの波動関数の基底が粒子のその複素共役になる時を、“dual” な選択と呼ぶことにするが、このときスピン上向きのグリーン関数 f_{ij} と下向きのグリーン関数 g_{ij} の間に

$$f_{ij} = \begin{cases} \delta_{ij} - g_{ij}^* & \text{for } |i-j| = \text{even} \\ g_{ij}^* & \text{for } |i-j| = \text{odd} \end{cases}$$

という関係式が成り立つことを示すことができる。さらに、この関係式は一般の N に対する half-filling の場合 ($N = 2M_f$) にも成り立つ。

カイラル秩序パラメータ χ_{SO} の期待値は、正方格子をなすプラケットの 3 個の頂点に乗った 3 個のスピン演算子の積

$$E_{123} \equiv \langle \vec{\sigma}_1 \cdot (\vec{\sigma}_2 \times \vec{\sigma}_3) \rangle = -2i(P_{l_{123}} - P_{l_{132}})$$

で定義され、これがゼロでない期待値を持てば、パリティと時間反転不変性を破る。

この右辺の $P_{l_{123}}$ は、

$$P_{l_{123}} = \langle \chi_{12} \chi_{23} \chi_{31} \rangle = \langle c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} c_{2\sigma'}^\dagger c_{3\sigma'} c_{3\sigma''}^\dagger c_{1\sigma''} \rangle$$

と 6 点関数で表され、2 点グリーン関数の 3 個の積の和で書けるが、上記の関係式は、 $\text{Im}(P_{l_{123}} - P_{l_{132}})$ がゼロになることを導くことを示すことができる。

数値計算は、 4×4 の格子上で、上記の “dual” な波動関数を取り、half-filling ($M_f = 8$)、ホールを 2 個 ($M_f = 7$) 及び 4 個 ($M_f = 5$) ドープした場合の 3 つの場合について、様々の温度についてモンテカルロシミュレーションを行ない、2 点グリーン関数、スピン相関、電荷相関、 χ_{SO} 等を測定した。その際、ドープを行った場合には、量子モンテカルロ法特有の符号問題を扱わなくてはならない (half-filling の場合はこの問題はない)。われわれの場合には、これが位相問題になるが、位相の平均値を β の関数として測定し、その実部が負符号の場合と同じように比較的大きな β で β の増加とともに指数関数的に減少する振る舞いが得られた。図は $M_f = 5$ の場合の結果を示している。計算結果の妥当性をチェックするために、2 点グリーン関数、スピン相関については、Palora 達のランチョス法の結果と比較を行い、half-filling、及び 2 種のドープの場合すべてに対して、非常に良い一致を見た。このことは、試行関数を用いた計算が、十分大きな β でなされていることを示唆している。このことと、さらに half-filling では解析的にゼロになる χ_{SO} を数値的にも確かめ、 $M_f = 7$ の場合と $M_f = 5$ の場合を χ_{SO} を測定してみた。後者は、エラーの範囲でゼロにな

ることがわかった。前者に関しては、比較的小さな β ($\beta = 3.0$) で有限の期待値を示したが、 β の増加に対して符号問題からくるエラーが増大し、残念ながら、意味のある結果は得られなかった。このことに対しては、符号問題を緩和する何らかの方法を適用するとともに、カイラル秩序を陽に破ることによって、その破れの効果がゼロになる振る舞いを調べる方法を開発する必要があると思われる。

最後に、この短い報告では、参考文献をはぶきました。詳しい内容と文献については、プレプリントを参照してください。

