

2-dimensional Heisenberg model v.s. Fermion in Magnetic field

金沢大 自然 榊原 和彦

1 Introduction

ここでは2次元 $S = \frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg spin system を fermion system で近似する事を考える。

Heisenberg model の近似理論としては、修正スピン波理論が大きな成功をおさめているが、なぜあらためて fermion による近似理論を考えるかは、次の理由があるからである。

酸化物高温超伝導体を記述すると期待される model に $t-J$ model がある。この model を扱うために、我々は slave-fermion 法が有効と考えている。これはスピン自由度を boson、ホール自由度を fermion、で表示するものであるが、拘束条件をより単純化するため CP^1 boson(拘束条件のついた boson) によってスピン自由度を記述してやる[1]。この表示を用いると、hole fermion は、doping に比例した小さな fermi 面をもつ。補集合的な部分が、実験的に観測されている大きな fermi 面を出すと考えられるが、 CP^1 変数で書かれているスピン自由度を、例えば massive boson で近似してやると、大きな fermi 面は得られない。そこでこのスピン自由度を、fermion で近似することを考えたい。

ここでは先ず、 $t-J$ model ではなく、より理解の進んでいる Heisenberg model において、fermion による近似理論をつくり、boson による近似理論と比較してみる。

この研究は近畿大 松居哲生氏と東大 高野浩志氏との共同研究によるものである。

2 spin 変数と Hard Core Boson(HCB)変数の関係

格子上のスピン変数を HCB 変数で書き換える。HCB とは、point-like な強い斥力で相互作用する boson であり、その名の通り堅い核を持ったようなものである。代数的には、HCB 演算子 ϕ_x は異なった格子点上では boson と同様に交換関係を満たし、同一点上では fermion の様に反交換関係を満たす。

$$\begin{aligned}
 [\phi_x, \phi_y] &= 0, \\
 [\phi_x, \phi_y^\dagger] &= 0, \\
 \{\phi_x, \phi_x\} &= 0, \\
 \{\phi_x, \phi_x^\dagger\} &= 1
 \end{aligned} \tag{1}$$

従って同一格子点上で $\phi_x^\dagger \phi_x$ は 0 または 1 の値しか取らない。

ここで

$$S_{1,x} = \frac{1}{2} (\phi_x + \phi_x^\dagger),$$

$$\begin{aligned} S_{2,x} &= \frac{i}{2} (\phi_x - \phi_x^\dagger), \\ S_{3,x} &= \frac{1}{2} - \phi_x^\dagger \phi_x \end{aligned} \quad (2)$$

と言うふうにスピン変数を HCB 変数で書いてやると、(1)の交換関係を用いてスピン変数は通常の交換関係

$$[S_{i,x}, S_{j,x}] = i\epsilon_{i,j,k} S_{k,x} \quad (3)$$

を満たすようになる。また CP^1 も同様に有限の次数であらわされる。

$$\begin{aligned} z_{i,\uparrow} &= 1 - \phi_i^\dagger \phi_i, \\ z_{i,\downarrow} &= \phi_i, \end{aligned} \quad (4)$$

spin 変数から HCB 変数への書き換えは厳密であり、各格子点上の状態空間は、spin の up, down ($\uparrow\downarrow$) と HCB のある・無し(1,0)で1対1に対応している。反強磁性 Heisenberg Hamiltonian (H_{AFH})は、

$$H_{AFH} = 2J \sum_{x,\mu} \vec{S}_{x+\mu} \cdot \vec{S}_x \quad (5)$$

$$= J \sum_{x,\mu} \left[(\phi_{x+\mu}^\dagger \phi_x + h.c.) - (\phi_x^\dagger \phi_x + \phi_{x+\mu}^\dagger \phi_{x+\mu}) + 2\phi_{x+\mu}^\dagger \phi_{x+\mu} \phi_x^\dagger \phi_x + \frac{1}{2} \right] \quad (6)$$

の様に、4体相互作用を持つ HCB system に書き直すことができる。

結局、fermion による近似も、boson による近似も、この HCB を如何に近似するかという問題になる。

3 fermion による近似理論

fermion による近似理論をつくるために、HCB を2次元 Jordan-Wigner 変換によって書き表してみる。 ϕ_x は正準 fermion 演算子 ξ_x, ξ_x^\dagger によって次のように Jordan-Wigner(JW)変換によって表される[2]。

$$\begin{aligned} \phi_x &= W_x \xi_x, \\ W_x &= \exp \left(i \sum_{z \neq x} G_{x,z} \xi_z^\dagger \xi_z \right) \end{aligned} \quad (7)$$

ここで二点関数 $G_{x,z}$ は HCB 変数 ϕ の交換関係を満たすために次の条件を満たさなければならない。

$$G_{z,x} = G_{x,z} + \pi \pmod{2\pi} \quad (8)$$

ここでは x 軸からの x - z の偏角を採った。(詳細は高野氏の記事を参照して下さい。) JW 変換(7)によって HCB の Hamiltonian (6)は、

$$\begin{aligned} H_B &= \sum_{x,\mu} \left[\left(\xi_{x+\mu}^\dagger \exp \left(-i \sum_z \nabla_\mu G_{x,z} \xi_z^\dagger \xi_z \right) \xi_x + h.c. \right) \right. \\ &\quad \left. - \xi_{x+\mu}^\dagger \xi_{x+\mu} - \xi_x^\dagger \xi_x + 2\xi_{x+\mu}^\dagger \xi_{x+\mu} \xi_x^\dagger \xi_x + \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

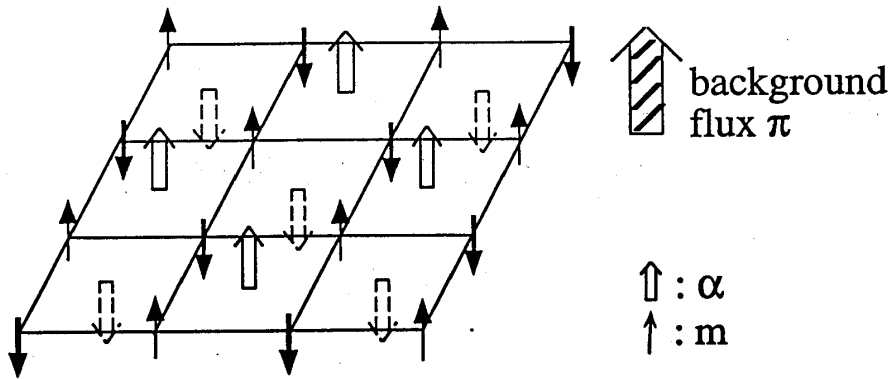


fig.

この Hamiltonian は、non-local な相互作用を持つため、なんらかの近似のもとでしか取り扱えない。そこで H_B の fermion による平均場理論として次のような Hamiltonian H_F を考える。

$$H_F = \sum_{x,\mu} \left[\xi_{x+\mu}^\dagger \exp(-iA_{x,\mu}) \xi_x + H.c. \right] + \sum_x \left[m_x \xi_x^\dagger \xi_x \right] + \sum_{x,\mu} \left[\chi_{x,\mu} \xi_{x+\mu}^\dagger \xi_x \right] \quad (10)$$

Jordan-Wigner fermion を使った表示は、fermion + Chern-Simons term の system と考えられる。従って、ここで $A_{x\mu}$ は古典的な vector potential で link 上の変数であり、各 plaquette に対し一定の磁場 $B = \pi$ を持つようにとる (fermion density=0.5 となるので、total magnetization は 0)。また m_x は、4 体相互作用からのくり込みを受けた mass である。

さらに解き易くするため、 χ 言い直せば 4 体相互作用による効果は、amplitude を rescale して 1 にできると仮定し、 $A_{x\mu}$ に対する繰り込みだけと考える。そこで我々は、次の変分 Hamiltonian を用いて解析する事を考える。

$$H_{var} = \sum_{x,\mu} \left[\xi_{x+\mu}^\dagger \exp(-i\bar{A}_{x,\mu}) \xi_x + H.c. \right] + \sum_x \left[M_x \xi_x^\dagger \xi_x \right] \quad (11)$$

ここで、 $\bar{A}_{x,\mu}$ は $\pi \pm \alpha$ の flux をつくる外場になる。また M_x は、(10) の m_x の内 ground state をつくるのに関係ない x-independent な部分を無視して、

$$M_x = \begin{cases} m & x \in \text{odd} \\ -m & x \in \text{even} \end{cases}$$

とする。fermion の density は 0.5 となるので、total magnetization は 0 である。

つまり、 H_{var} の m および α を変分パラメータとして、Heisenberg model を解析する。この変分 Hamiltonian の系の物理的概観は、各プラケットに $2\pi \pm \alpha$ の staggered flux が入っており、fermion mass は、 S^3 の 1 次の項の係数となるので、さらに各 site に $\pm m$ の外部磁場がかかっているようなものである。(Fig)

現在の所、4*4 site の 2 次元正方格子 (free boundary) で $T=0$ の場合の ground state energy が、計算できており、その結果厳密対角化[3]と比較して、 $\alpha = 0.012\pi$ 、 $m = 0.761/J$ の時 93.4% となる。

4 まとめと今後の展望

2-D AF Heisenberg model の近似理論としては、modified spin wave theory (MSWT)[4] が、大変良い結果を与える。そこで、MSWT と fermion による近似理論を比べてみる。これは研究会の

後、おこなった仕事である。

MSWT は、結局 massive boson で HCB を近似するようなものである。Hamiltonian H_{MSW} は、

$$H_{MSW} = -\eta \frac{\lambda}{4} \sum_{x,\mu} [a_{x+\mu}^\dagger a_x^\dagger + H.c.] + \lambda \sum_x [a_x^\dagger a_x] \quad (12)$$

である。ただし[4]と異なり、fermion system と比較するために、free boundary でなおかつ、all order の Heisenberg Hamiltonian を評価しなければならない。そのため、平面波の代わりに、

$$f_k(x) = \frac{2}{L+1} \sin(k_1 x_1) \sin(k_2 x_2) \quad (13)$$

で展開する。また、ここでは Holstein-Primakoff boson を用いるが、 $\sqrt{1 - a_x^\dagger a_x}$ を $a_x^\dagger a_x = 0$ -space への projection operator と思って、 $\frac{1}{3}$ 展開によらず計算する。magnetization を出さないために total $S^3 = 0$ の条件のもとでつくった H_{MSW} の state で、 H_{AFH} を評価してやる。しかし、 H_{MSW} の state は H_{AFH} の定義域に入っておらず変分原理は満たしていない。そのため結果は、厳密解に比べ 176% になった。

以上 4*4 free boundary の結果をまとめると、

	-energy/bond	ising part
Exact	0.3829	0.1276
FMFT	0.3577	0.1562
BMFT	0.6751	0.5141

この仕事は、まだ始まったばかりで、projection operator を入れ、変分原理を満たすようにして BMFT を評価すること、有限温度の時の magnetization の評価、大きな size での計算、など多くの課題が残されており、現在解析中である。

参考文献

- [1] I. Ichinose and T. Matsui,
Mod.Phys.Lett.B4,955 (1990); Phys.Rev.B45,9976 (1992).
- [2] E. Fradkin, Phys.Rev.Lett. **63**, 322(1989).
- [3] 厳密対角化の計算には西森氏の TITPAC2 を使わせていただきました。
- [4] M. Takahashi, Phys. Rev. **B40**, 2494 (1989).