

SU(n) Hubbard模型における 平坦バンド強磁性の一般論

田村健祐 格子上の場の理論と連続空間上の場の理論 2022年7月20日

イントロダクション

■ 冷却原子系を用いたシミュレーション

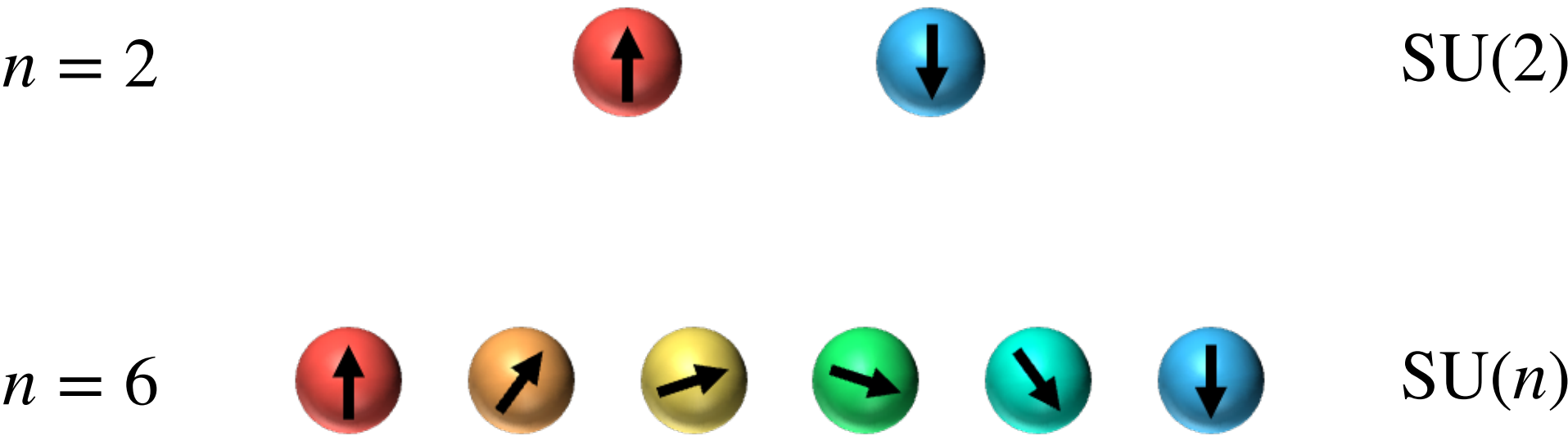
- 量子多体系を調べる、実験的・理論的な新たな舞台となる

■ SU(n) 対称性を持つ多成分フェルミオン系の実現

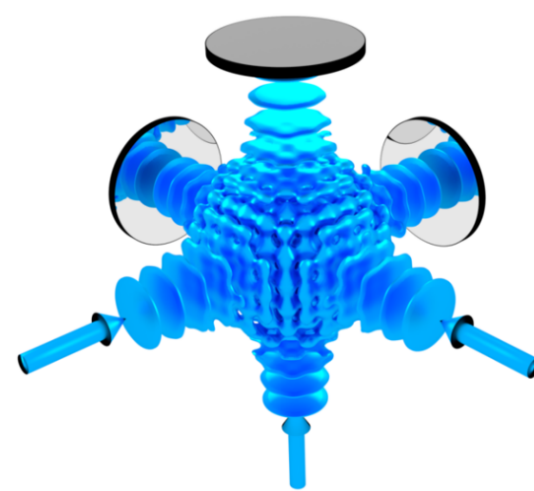
- 電子: $n = 2$
- アルカリ土類的な原子を用いた SU(n) 対称性の実現

$^{173}\text{Yb}: I = 5/2 \Rightarrow n = 2I + 1 = 6$

$^{87}\text{Sr}: I = 9/2 \Rightarrow n = 2I + 1 = 10$



■ 光学格子中に原子をトラップして、SU(n) 対称な相互作用をする格子上の遍歴系が実現可能



Gorshkov *et al.*, Nat. Phys. **6**, 289 (2010)
Taie *et al.*, Nat. Phys. **8**, 825 (2012)
Hofrichter *et al.*, PRX **6**, 021030 (2016)
Ozawa *et al.*, PRL **121**, 225303 (2018)

SU(n) Fermi-Hubbard 模型

■ SU(n) Fermi-Hubbard 模型 (FHM)

$$H = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{x,y \in \Lambda} t_{x,y} c_{x,\alpha}^\dagger c_{y,\alpha} + U \sum_{\alpha < \beta} \sum_{x \in \Lambda} n_{x,\alpha} n_{x,\beta}$$

Λ : 格子点(サイト)の集合

x, y : サイトのラベル

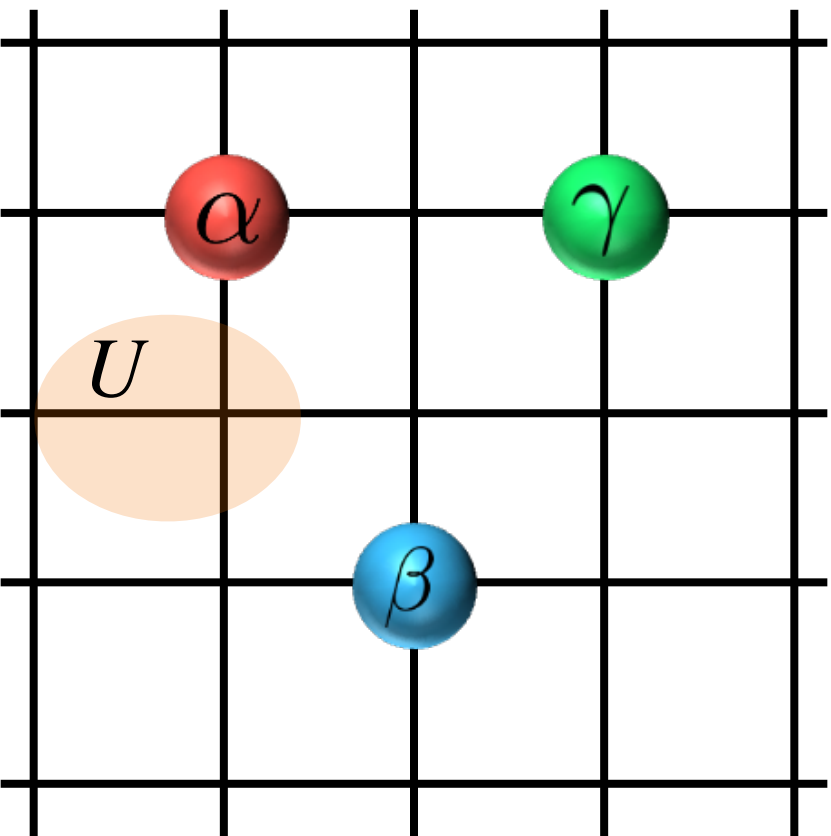
$\alpha = 1, \dots, n$: 内部自由度(カラー)のラベル

$c_{x,\alpha}^\dagger, c_{x,\alpha}$: サイト x でカラー α を持つフェルミオンの生成・消滅演算子

$n_{x,\alpha} = c_{x,\alpha}^\dagger c_{x,\alpha}$: サイト x で α を持つフェルミオンの数演算子

$t_{x,y}$: ホッピング行列

U : オンサイトの斥力相互作用 ($U > 0$)



■ SU(n) 対称性

$$[H, F^{\alpha,\beta}] = 0$$

$F^{\alpha,\alpha}$: カラー α を持つ粒子数

$$F^{\alpha,\beta} = \sum_{x \in \Lambda} c_{x,\alpha}^\dagger c_{x,\beta}$$

$F^{\alpha,\beta} (\alpha \neq \beta)$: カラーの昇降演算子

cf. SU(2) ... $N_\uparrow, N_\downarrow, S^+, S^-$

SU(n) Fermi-Hubbard 模型の厳密な結果

	SU(2)	SU(n) (n>2)
実現	多くの固体中の電子系	冷却原子系 SU(6) Taie, <i>et al.</i> , Nat. Phys. 8 825 (2012) SU(10) Gorshkov. <i>et al.</i> , Nat. Phys. 6 , 289 (2010)
厳密な結果	長岡強磁性 Nagaoka, PR 147 , 392 (1966) Tasaki, PRB 40 , 9192(1989) 平坦バンド強磁性 Mielke, J. Phys. A24 , 3311 (1991) Tasaki, PRL 69 , 1608 (1992) Tasaki, PTP 99 , 489 (1998) Tasaki, PRL 75 , 4678 (1995) 平坦バンド強磁性の一般論	SU(n) 長岡強磁性 Katsura, Tanaka, PRA 87 , 013617(2013) Bobrow, <i>et al.</i> , PRB 98 , 180101 (2018) SU(n) 平坦バンド強磁性 Ruijin Liu, <i>et al.</i> , Sci. Bull. 64 , 1490 (2019) Tamura, Katsura, PRB 100 , 214423(2019) Tamura, Katsura, J. Stat. Phys. 182 , 16 (2021) ?

平坦バンド強磁性の一般論の SU(n) FHM への拡張

平坦バンド強磁性

■ 平坦バンドと強磁性

- 遍歴電子系の強磁性のメカニズムの理解
- Stoner 条件 … 平均場理論的なアプローチに基づく強磁性発現条件
- 条件を満たす特異的な条件

$$UD_F \gtrsim 1$$

U : 相互作用

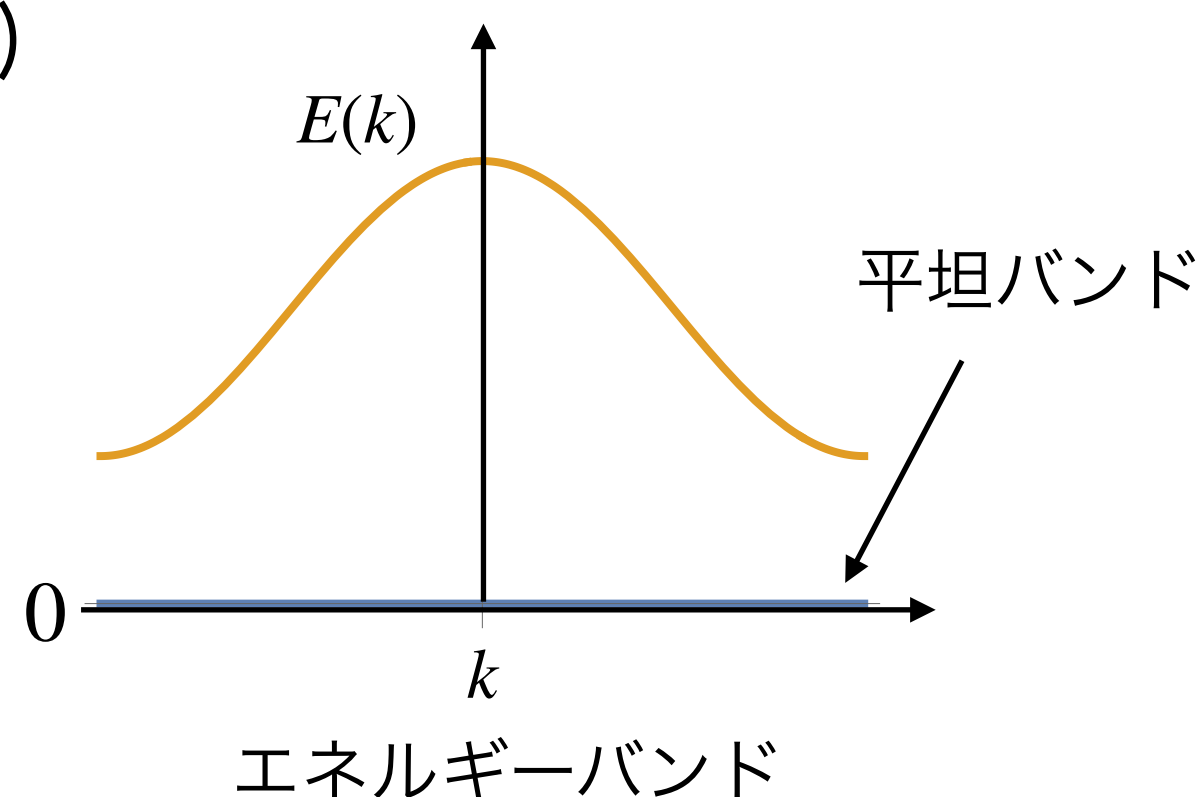
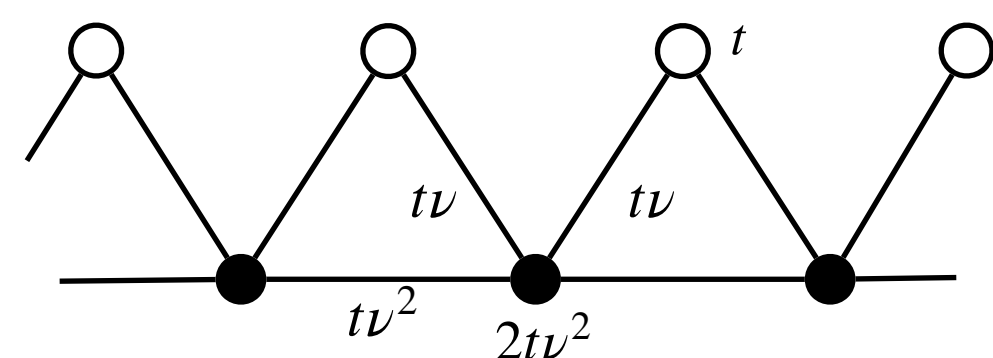
D_F : (自由粒子系の)フェルミエネルギーにおける状態密度

▶ $U = \infty$ … 長岡強磁性

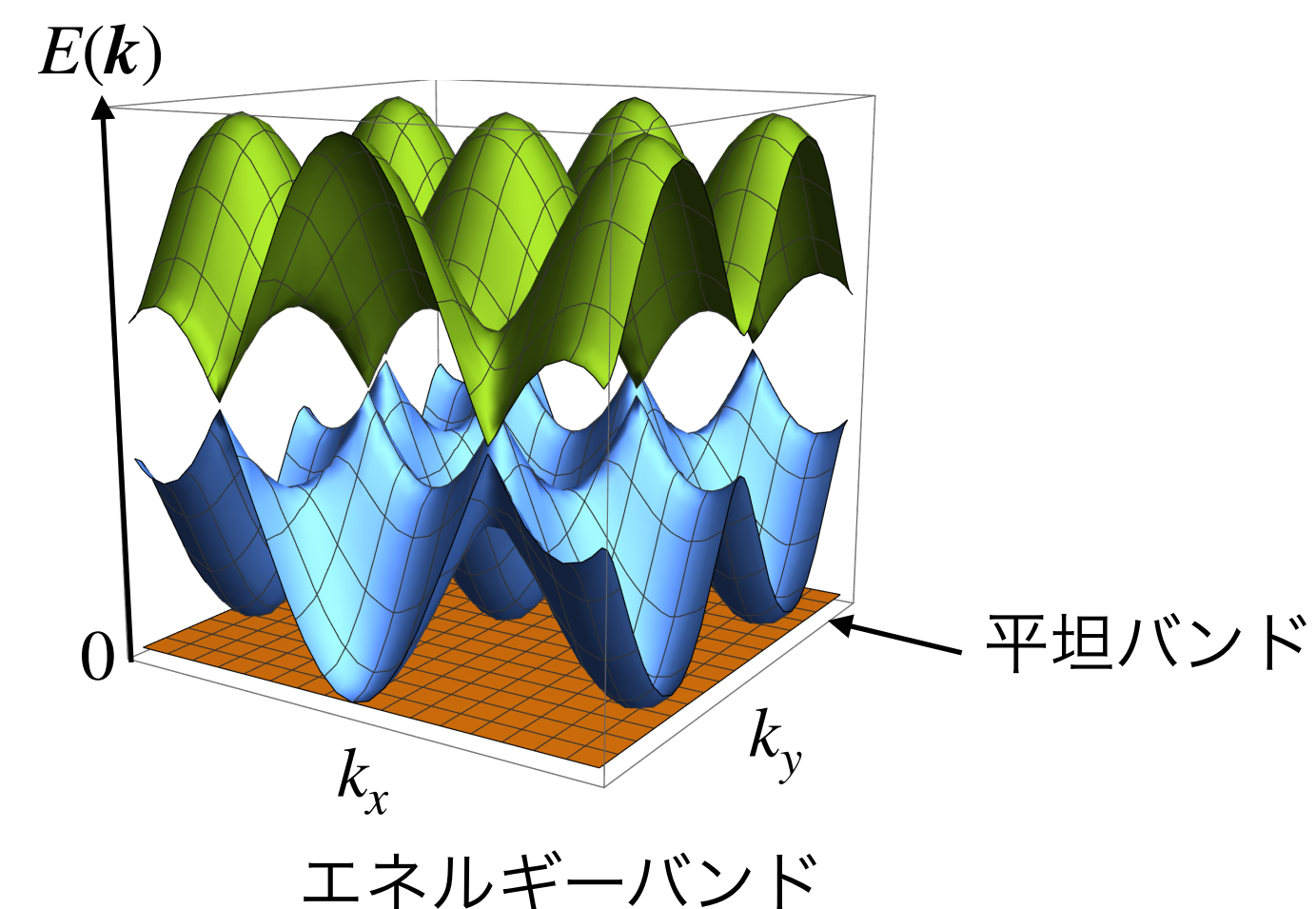
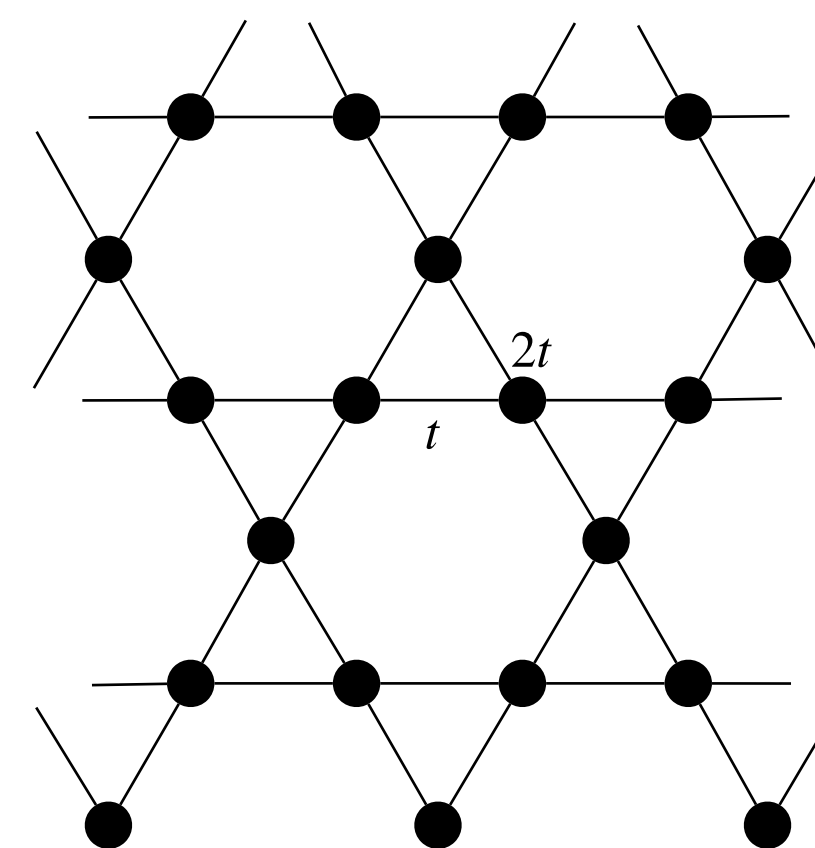
▶ $D_F = \infty$ … **平坦バンド系** $\longrightarrow$ 平坦バンド系では強磁性の発現が期待できる

- 平坦バンド系の例

デルタ鎖 (sawtooth chain)



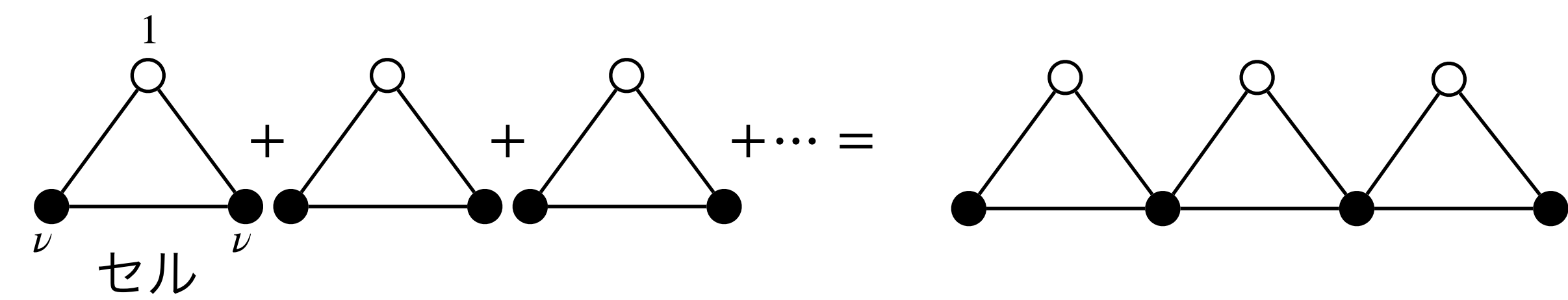
カゴメ格子



- 最低バンドが占有される粒子数の時に、基底状態が強磁性的であることを厳密に証明できる

平坦バンドの構成法

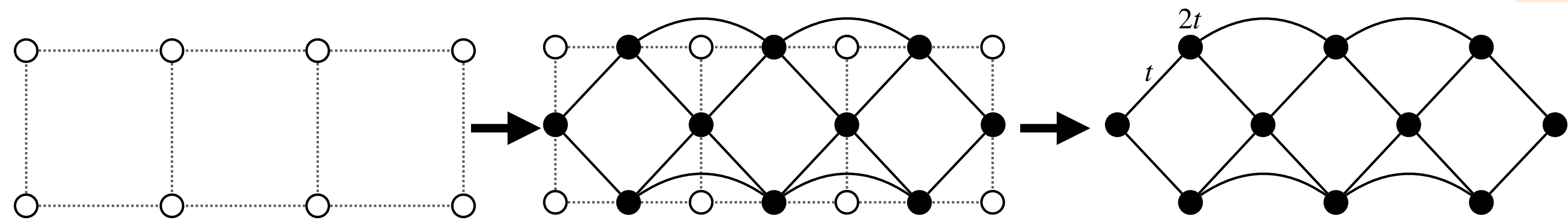
- セルに基づいた構成(田崎型) … ギャップド



SU(2) の結果を SU(n) に拡張可能

Ruijin Liu, *et al.*, Sci. Bull. **64**, 1490 (2019)
Tamura, Katsura, PRB **100**, 214423 (2019)
Tamura, Katsura, J. Stat. Phys. **182**, 16 (2021)

- ライングラフに基づいた構成(Mielke型) … ギャップレス



SU(n) への拡張は議論されていない

- 一般的な方法

$$T = S^\dagger S$$

$$S = (s_{\alpha,x})_{\alpha \in \tilde{\Lambda}, x \in \Lambda}$$

ゼロ固有値は $(|\Lambda| - |\tilde{\Lambda}|)$ 重に縮退する

SU(n) 強磁性の定義

■ SU(2) の場合

定義: SU(2) FHM における(強い意味の)強磁性の定義

SU(2) Fermi-Hubbard 模型で粒子数 N_f の場合を考える。

模型が強磁性を示すとは、任意の基底状態が S_{tot}^2 に対して $\frac{N_f}{2} \left(\frac{N_f}{2} + 1 \right)$ (最大固有値)を持つことをいう。

$$S_{\text{tot}}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2, \quad S_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda} c_{x,\sigma}^\dagger p_{\sigma,\tau}^{(\alpha)} c_{x,\tau}$$

■ 一般の SU(n) の場合

$$C_2 = \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha, \beta=1}^n F^{\alpha, \beta} F^{\beta, \alpha} - \frac{N_f^2}{n} \right): \text{2次の Casimir 演算子} \cdots S_{\text{tot}}^2 \text{ の一般化}$$

定義: SU(n) FHM における(強い意味の)強磁性の定義

SU(n) Fermi-Hubbard 模型で粒子数 N_f の場合を考える。

模型が強磁性を示すとは、任意の基底状態が C_2 に対して $\frac{(n-1)N_f}{2} \left(\frac{N_f}{2} + 1 \right)$ (最大固有値)を持つことをいう。

SU(n) 平坦バンド強磁性の一般論

■ セットアップ

$$H = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{x,y \in \Lambda} t_{x,y} c_{x,\alpha}^\dagger c_{y,\alpha} + U \sum_{\alpha < \beta} \sum_{x \in \Lambda} n_{x,\alpha} n_{x,\beta}$$

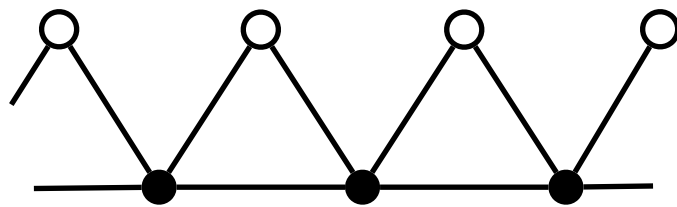
$T = \{t_{x,y}\}_{x,y \in \Lambda}$: ホッピング行列、 $T \geq 0$ $h_0 = \ker T$ 、 $D_0 = \dim h_0 > 0$

粒子数 $N_f = D_0$

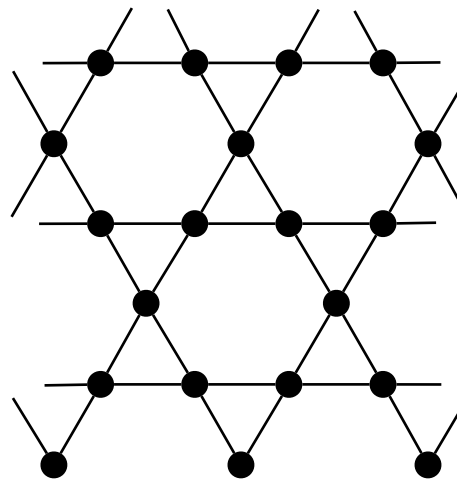
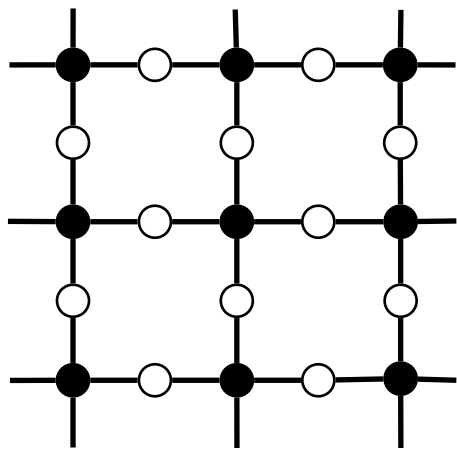
T のスペクトル



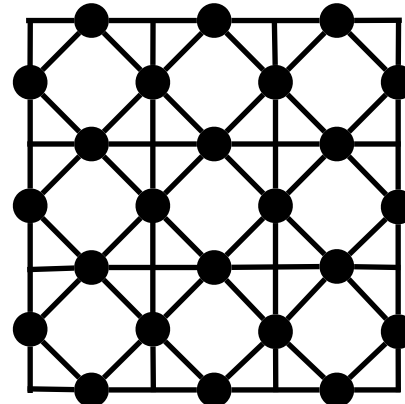
• 平坦バンドを持つ格子模型の例



(田崎型)



(Mielke型)



■ 定理 (平坦バンド強磁性の必要十分条件)

SU(2)の場合: Mielke, J. Phys. A, **32** 8411 (1999)

P_0 : h_0 への射影演算子 $\Lambda_0 = \{x \in \Lambda \mid (P_0)_{x,x} \neq 0\}$

H が SU(n) 強磁性を示す $\Leftrightarrow \left((P_0)_{x,y} \right)_{x,y \in \Lambda_0}$ が既約

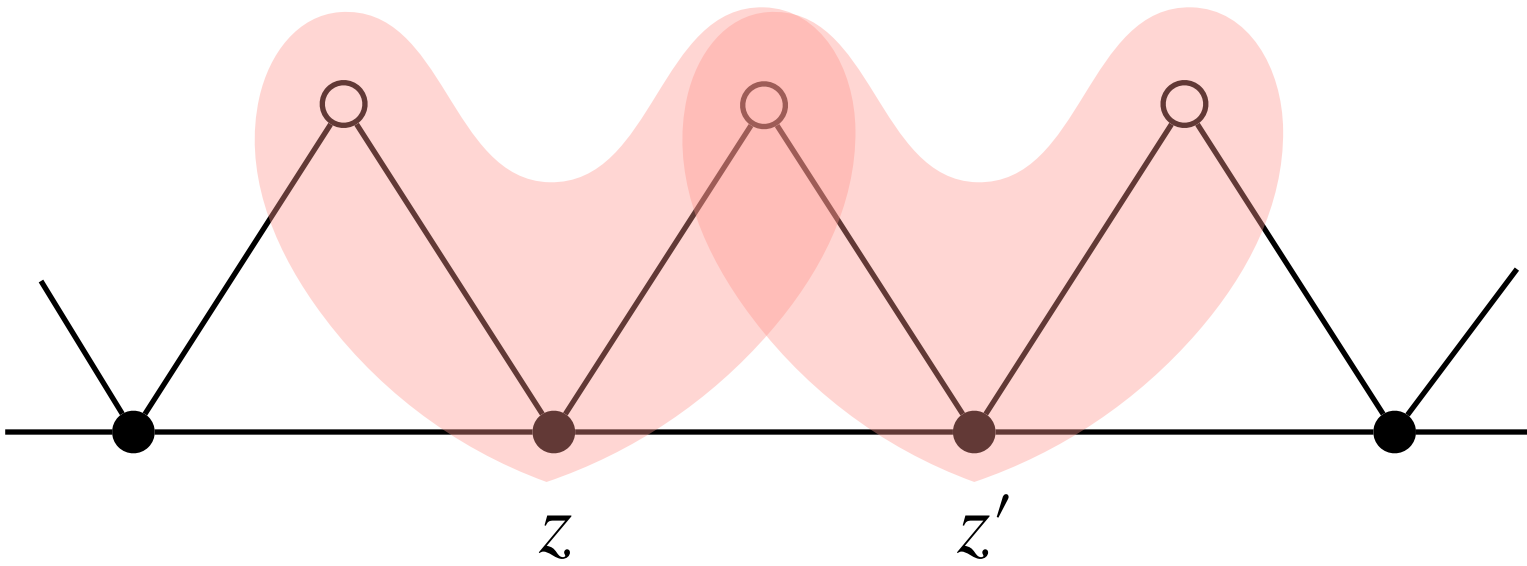
既約 $\Leftrightarrow$ 添字を並び替えて $P_0 = \begin{pmatrix} P_0^{(1)} & 0 \\ 0 & P_0^{(2)} \end{pmatrix}$ とできない

定理の証明のアウトライン

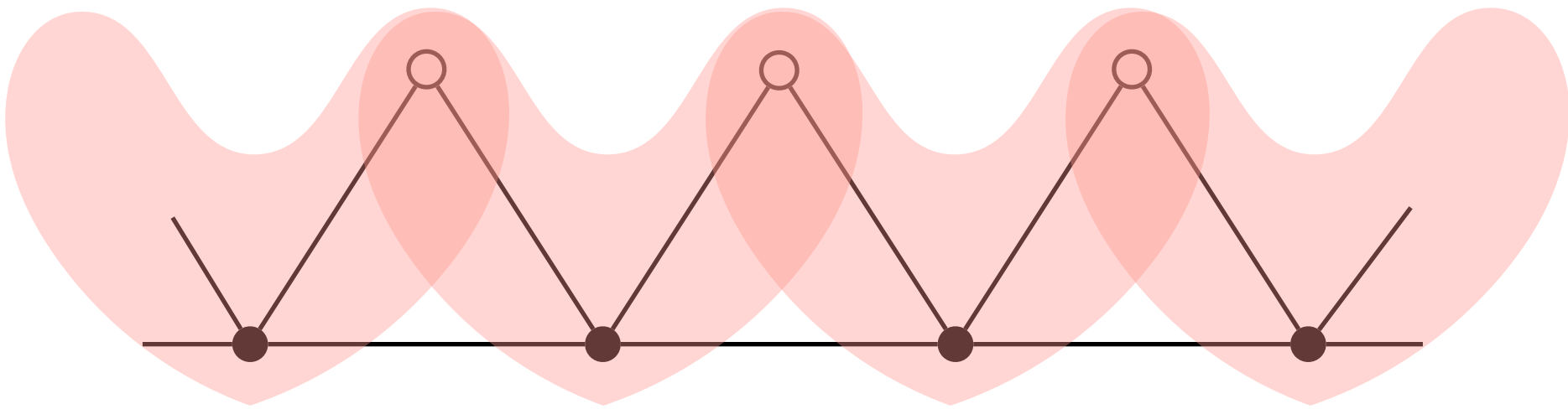
補題: $|I| = D_0$ となるような $I \subset \Lambda$ を取ることができて、 $z, z' \in I$ に対し、
 $\mu_z(z) \neq 0$ かつ $\mu_z(z') = 0$ ($z \neq z'$ の時) となる h_0 の基底 $\{\mu_z\}_{z \in I}$ を取ることができる。

- 基底 $\{\mu_z\}_{z \in I}$ の連結性について

μ_z と $\mu_{z'}$ が 連結



基底 $\{\mu_z\}_{z \in I}$ が連結



- 定理の証明のステップ

ステップ 1. $\left((P_0)_{x,y} \right)_{x,y \in \Lambda_0}$ の既約性 $\Leftrightarrow \{\mu_z\}_{z \in I}$ の連結性

ステップ 2. $\{\mu_z\}_{z \in I}$ の連結性 $\Leftrightarrow \text{SU}(n)$ 強磁性

定理の証明のアウトライン(ステップ2)

- H の半正定値性

$$H = H_{\text{hop}} + H_{\text{int}}$$

$$\mathbb{T} \geq 0 \Rightarrow H_{\text{hop}} = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{x,y \in \Lambda} t_{x,y} c_{x,\alpha}^\dagger c_{y,\alpha} \geq 0 \qquad H_{\text{int}} = U \sum_{\alpha < \beta} \sum_{x \in \Lambda} n_{x,\alpha} n_{x,\beta} = U \sum_{\alpha < \beta} \sum_{x \in \Lambda} (c_{x,\alpha} c_{x,\beta})^\dagger (c_{x,\alpha} c_{x,\beta}) \geq 0$$

$A \geq 0$ かつ $B \geq 0$ とする。

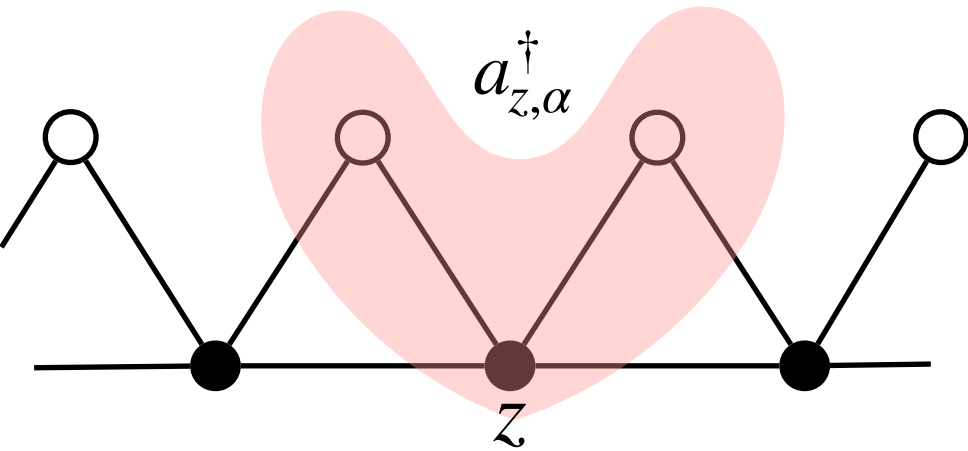
$(A + B)|\phi\rangle = 0$ ならば $A|\phi\rangle = B|\phi\rangle = 0$ である。

$$H|\Phi_{\text{GS}}\rangle = 0 \Leftrightarrow H_{\text{hop}}|\Phi_{\text{GS}}\rangle = 0 \text{ かつ } H_{\text{int}}|\Phi_{\text{GS}}\rangle = 0$$

- $H_{\text{hop}}|\Phi_{\text{GS}}\rangle = 0$

- ▶ $|\Phi_{\text{GS}}\rangle$ は H_{hop} のゼロエネルギー状態だけで構成される。

- ▶ $a_{z,\alpha}^\dagger = \sum_{x \in \Lambda} \mu_z(x) c_{x,\alpha}^\dagger$: H_{hop} ゼロエネルギー 1 粒子状態

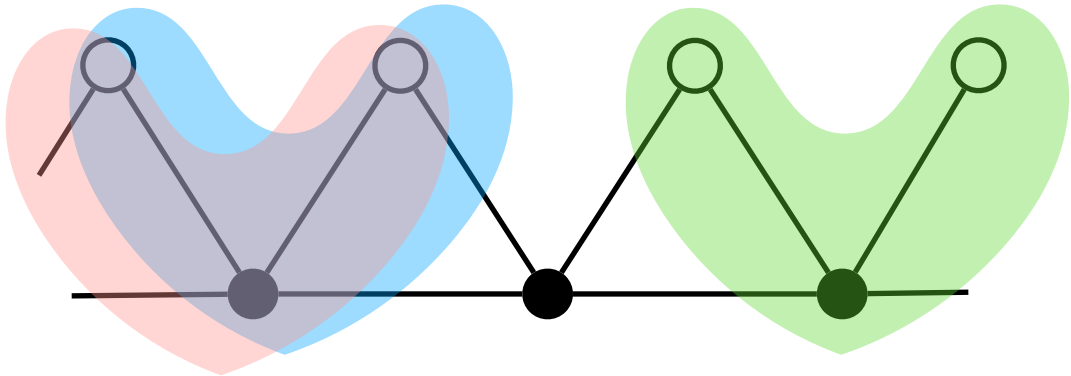
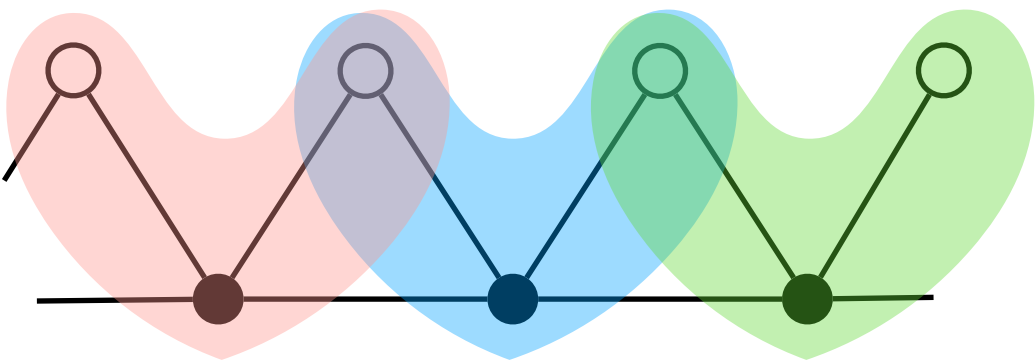


$$|\Phi_{\text{GS}}\rangle = \sum_{I_1, I_2, \dots, I_n} g(I_1, \dots, I_n) \left(\prod_{z \in I_1} a_{z,1}^\dagger \right) \left(\prod_{z \in I_2} a_{z,2}^\dagger \right) \cdots \left(\prod_{z \in I_n} a_{z,n}^\dagger \right) |\text{vac}\rangle \qquad \sum_{\alpha=1}^n |I_\alpha| = N_f = D_0$$

定理の証明のアウトライン(ステップ2)

• $H_{\text{int}}|\Phi_{\text{GS}}\rangle = 0 \Leftrightarrow c_{x,\alpha}c_{x,\beta}|\Phi_{\text{GS}}\rangle = 0$

▶ $x \in I$



U

$$|\Phi_{\text{GS}}\rangle = \sum_{\alpha=(\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_{N_f})} C(\alpha) \left(\prod_{x \in I} a_{x,\alpha_x}^\dagger \right) |\text{vac}\rangle$$

▶ $x \notin I$

$$(C(\alpha_z = \beta, \alpha'_z = \alpha) - C(\alpha_z = \alpha, \alpha'_z = \beta)) \mu_z(x) \mu_{z'}(x) = 0 \quad \alpha, \beta = 1, \dots, n, \quad \forall z, z' \in I$$

$\{\mu_z\}_{z \in I}$ の連結性を仮定すると $C(\alpha)$ は α_z の入れ替えに対して完全対称な係数となる

$$C(\alpha_z = \beta, \alpha'_z = \alpha) = C(\alpha_z = \alpha, \alpha'_z = \beta)$$

$$|\Phi_{\text{GS}}\rangle = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots$$

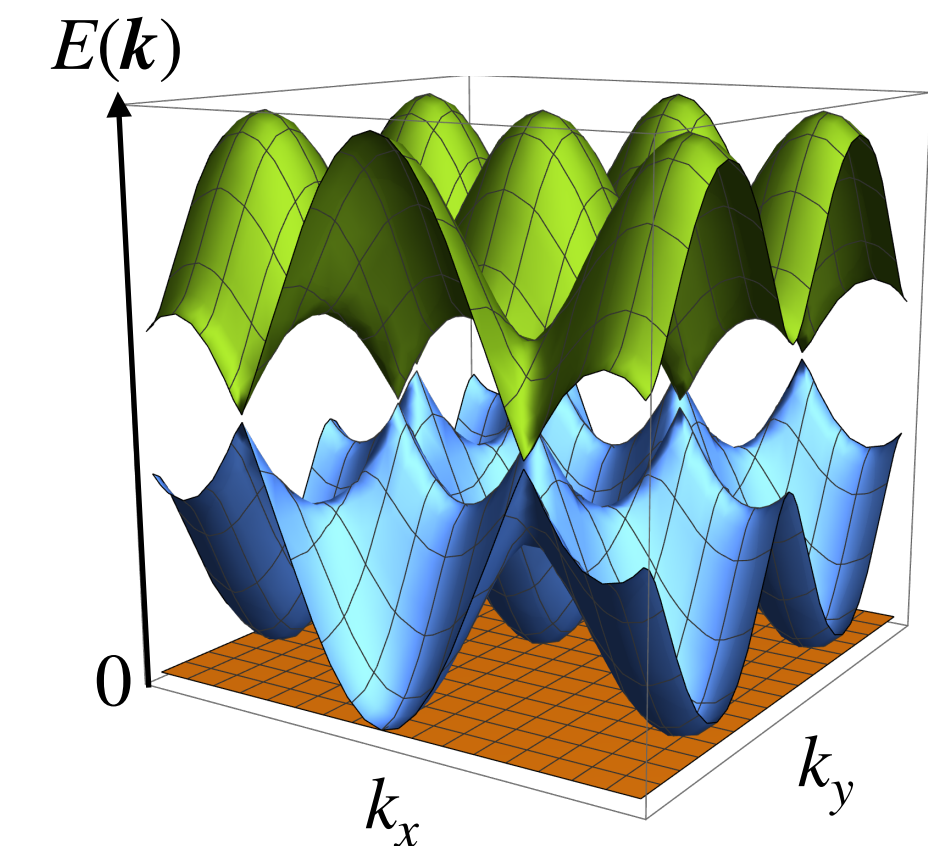
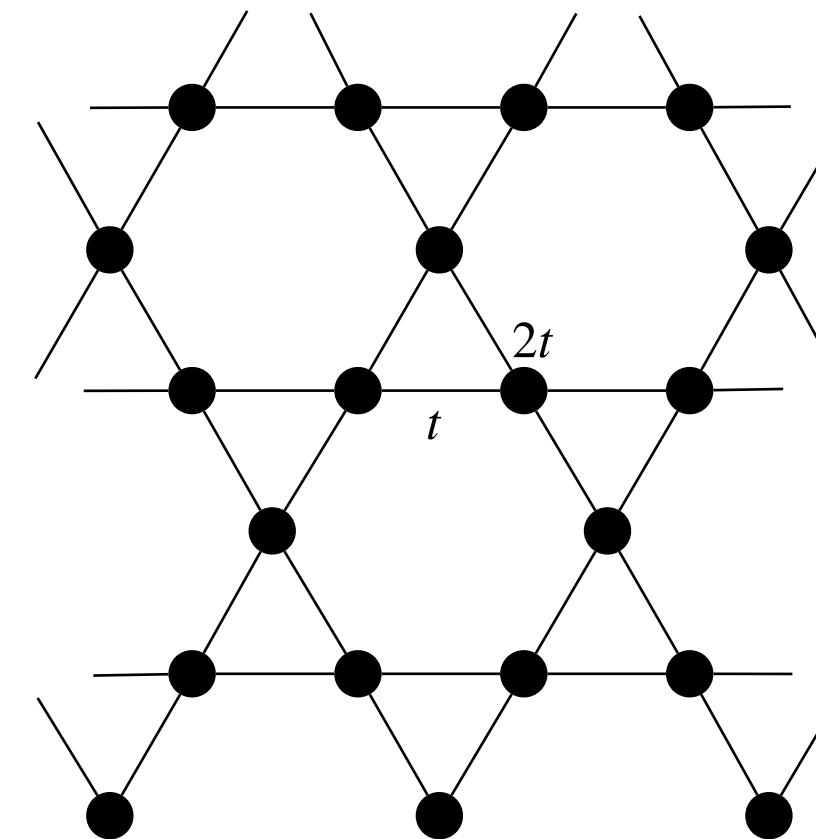
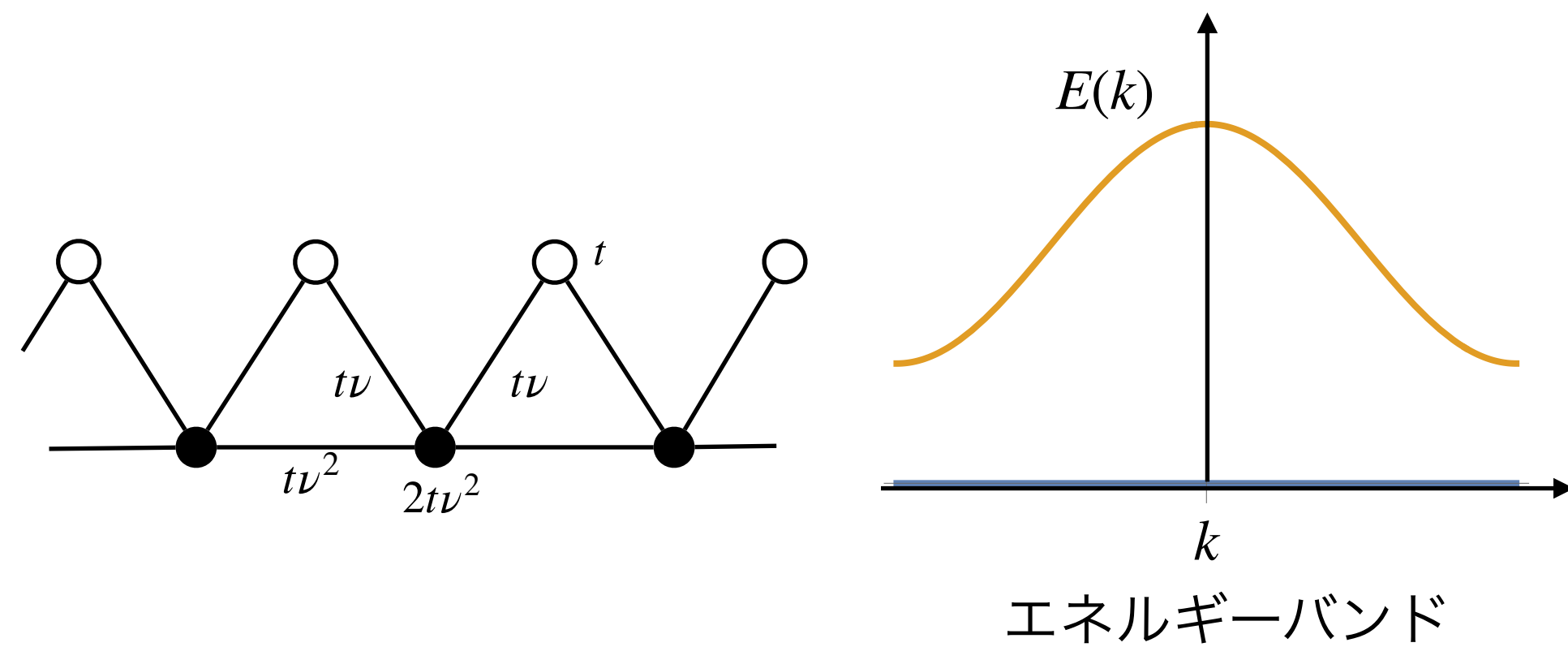
完全対称な状態は C_2 に対して固有値 $\frac{(n-1)N_f}{2} \left(\frac{N_f}{2} + 1 \right)$ を持つことが言える... **SU(n) 強磁性**

(逆に連結でない時は、これ以外の固有値を持つ基底状態も許される)

まとめ

■ 平坦バンド強磁性の一般論の $SU(n)$ FHM への拡張

- 任意の平坦バンド(ギャップド or ギャップレス) に対する強磁性を示す必要十分条件



- $SU(n)$ FHM が平坦バンド強磁性を示す $\Leftrightarrow \left((P_0)_{x,y} \right)_{x,y \in \Lambda_0}$ が既約

$$|\Phi_{GS}\rangle = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]} + \dots$$

The diagrams show the ground state wavefunction $|\Phi_{GS}\rangle$ as a superposition of configurations. Each configuration is a 1D chain of sites (black dots) with hopping parameters $t\nu^2$ and $2t\nu^2$. The sites are colored (red, blue, green) to represent different states.