

DODS 型 Hartree-Fock-Bogoliubov 理論の定式化

山形大学 理工学研究科 M2 志田佳祐

1 はじめに

スピン密度分布のゆらぎを無視できる超伝導状態は BCS 模型で記述することができた。しかし、高温超伝導体や非超伝導状態は BCS 模型で記述することができない。そこで異なるスピンに対して異なる軌道 (Different Orbital for Different Spin:DODS) を与えることで、そのスピン密度分布のゆらぎをもった状態を表現できる。

2 BCS 模型と Bogoliubov 変換

HFB 理論に入る前に簡単に BCS 模型での Bogoliubov 変換と真空状態を紹介しておく。BCS 模型での Bogoliubov 変換は、

$$\alpha_k^\dagger = u_k c_k^\dagger + v_k c_{\bar{k}} \quad (1)$$

$$\alpha_k = u_k c_k + v_k c_{\bar{k}}^\dagger, \bar{k} = -k \quad (2)$$

$$(3)$$

であり、真空状態は

$$|BCS\rangle = \prod_{k \neq 0} \alpha_k \alpha_{\bar{k}} |0\rangle \quad (4)$$

$$\propto \prod_{k \neq 0} (v_k + u_k c_k^\dagger c_k^\dagger) |0\rangle \quad (5)$$

である。ここで $u_{\bar{k}} = u_k, v_{\bar{k}} = -v_k, u_k^2 + v_k^2 = 1$ を満たす実数であり、 k は電子の状態である (−の符号はスピンや運動の向きが k とは逆向きであることを意味する)。BCS 模型の場合は、スピンと運動の向きが逆である状態同士の線形結合であり、これは従来の Bogoliubov 変換の特殊な場合である。

従来の Bogoliubov 変換とその真空状態は、

$$(\beta^\dagger \beta) = (c^\dagger c) \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$|HFB\rangle = \prod_{k=1}^M \beta_k |0\rangle \quad (7)$$

である。この変換はBCSとは違い、色々な状態の線形結合である。これがどのような変換かイメージするため、Bloch - Messiah の定理により三つの行列に分解する。:

$$w = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U} & \bar{V} \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C^* \end{pmatrix} \quad (8)$$

ここで D と C はユニタリー行列であり、 \bar{U} と \bar{V} は

$$\bar{U} = \begin{pmatrix} I_n & & \\ & U_{2m} & \\ & & 0_{M-n-2m} \end{pmatrix}, \bar{V} = \begin{pmatrix} 0_n & & \\ & V_{2m} & \\ & & I_{M-n-2m} \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$U_{2m} = \begin{pmatrix} u_1 & & & \\ & u_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & u_m \\ & & & & u_m \end{pmatrix}, V_{2m} = \begin{pmatrix} & v_1 & & \\ -v_1 & & & \\ & & \ddots & \\ & & & v_m \\ & & & & -v_m \end{pmatrix} \quad (10)$$

であり、 u_i, v_i は正の実数である。この変換を原子軌道 c^\dagger, c にかかる順番で見えていくと、

1. 最初に、原子軌道から分子軌道への変換

$$(a^\dagger \ a) = (c^\dagger \ c) \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D^* \end{pmatrix} \quad (11)$$

2. そして、BCS 的な変換

$$(\alpha^\dagger \ \alpha) = (a^\dagger \ a) \begin{pmatrix} \bar{U} & \bar{V} \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \quad (12)$$

3. 最後に、ユニタリー変換を行う。

$$(\beta^\dagger \ \beta) = (\alpha^\dagger \ \alpha) \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C^* \end{pmatrix} \quad (13)$$

という変換である。BCS では D, C が単位行列である特別な変換であるとわかる。

3 DODS 型 Hartree-Fock-Bogoliubov 理論

スピン密度分布にゆらぎがある高温超伝導体や非超伝導状態は、BCS や従来の Bogoliubov 変換では記述することができない。

そのため、つぎのような Bogoliubov 変換を考える。

$$w = \begin{pmatrix} U^{\uparrow\uparrow} & 0 & 0 & V^{\uparrow\downarrow*} \\ 0 & U^{\downarrow\downarrow} & V^{\downarrow\uparrow*} & 0 \\ 0 & V^{\uparrow\downarrow} & U^{\uparrow\uparrow*} & 0 \\ V^{\downarrow\uparrow} & 0 & 0 & U^{\downarrow\downarrow*} \end{pmatrix} \quad (14)$$

このとき、ゆらぎの無視できる状態であれば $(U^{\uparrow\uparrow})_{ij}$ と $(U^{\downarrow\downarrow})_{ij}$ は位相が異なるだけであり、 V 同士も同様である。DODS 型の HFB 理論では位相だけでなく大きさも異なる成分

を持たせることでスピン密度分布のゆらぎを表せる理論である。この変換によって、次の平均場ハミルトニアンを

$$H = \sum_{i,j=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t_{ij\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i,j,k,l=1}^M \bar{v}_{i\uparrow j\downarrow, k\uparrow l\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{k\uparrow} \quad (15)$$

$$\rightarrow H_0 + \sum_{i=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_{i\sigma} \beta_{i\sigma}^\dagger \beta_{i\sigma} \quad (16)$$

の形に近似する。ここで擬粒子間相互作用項は無視した。

このハミルトニアンの期待値が、極小値となるような行列を変分法によって求める。ここで Bogoliubov 変換の簡単な例である BCS の真空状態 (5) を見ると、異なる粒子数をもつ状態の重ね合わせであることがわかる。このことは HFB の真空状態でも同じである。そのため、 $\langle N \rangle = \sum_{i=1}^{2M} \langle HFB | c_i^\dagger c_i | HFB \rangle = (\text{一定})$ の条件から、つぎの Lagrange の未定乗数法を考える。

$$L(Z) = \langle HFB(Z) | (H - \mu N) | HFB(Z) \rangle \quad (17)$$

$$|HFB(Z)\rangle = \exp\left\{ \sum_{i,j=1}^{2M} Z_{ij} \beta_i^\dagger \beta_j^\dagger \right\} |HFB(0)\rangle, \quad Z_{ij} = -Z_{ji} \quad (18)$$

ここで $1 \leq i, j \leq M$ を \uparrow の状態、 $M+1 \leq i, j \leq 2M$ を \downarrow の状態とする。また、(18) の変換は Thouless 変換である。

極小値近傍での変換から、Bogoliubov 変換の U_{ij}, V_{ij} が満たす方程式は

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} E \quad (19)$$

である。ここで

$$h_{kk'} = t_{kk'} - \mu \delta_{kk'} + \sum_{i,j=1}^{2M} \bar{v}_{kik'j} \rho_{ji} \quad (20)$$

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2M} \bar{v}_{kk'ij} \kappa_{ji} \quad (21)$$

$$E = \begin{pmatrix} E_1 & & \\ & \ddots & \\ & & E_{2M} \end{pmatrix} \quad (22)$$

であり、 $\rho = V^* V^T, \kappa = U^* V^T$ である。

4 今後の課題

- 以上の事柄に関して数値計算を実践していきたい。
- 今回は状態が一つであったが、直交していない真空状態を重ね合わせる共鳴 HFB にも挑みたい。

5 参考文献

- (1) P.Ring,P.Schuck : The Nuclear Many-Body Problem pp.244-255 (Springer, 1980)
- (2) 福留秀雄、西山精哉 : Resonating Hartree-Bogoliubov Theory for a Superconducting Fermion System with Large Quantum Fluctuations(Progress of Theoretical Physics, Vol.85, No.6, june 1991)
- (3) 斎藤正彦 : 線型代数入門 (東京大学出版会, 1966)
- (4) 高橋康 : 物性研究者のための場の量子論 (培風館, 1974)