

Hubbard 模型中的相位弦效应与交互 Chern-Simons 理论

张龙 翁征宇

Phase string effect and mutual Chern-Simons theory of Hubbard model

Zhang Long Weng Zheng-Yu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 217101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.217101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.217101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I21>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一维扩展离子 Hubbard 模型的相图研究

Phase diagram of the one-dimensional extended ionic Hubbard model

物理学报.2015, 64(10): 107101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107101>

Researches on the electrical properties of vanadium oxide thin films on Si substrates

物理学报.2015, 64(1): 017102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017102>

在半导体-金属相变温度附近氧化钒 $\square \wedge$ 度 \square 灾实囊斐 1 澗

Abnormal variation of optical properties of vanadium oxide thin film at semiconductor-metal transition

物理学报.2014, 63(10): 107104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107104>

两种扩展 Harper 模型的波包动力学

Wave packet dynamics of two extended Harper models

物理学报.2011, 60(9): 097104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.097104>

专题: 超导和关联体系研究进展

Hubbard模型中的相位弦效应与交互 Chern-Simons理论*

张龙 翁征宇†

(清华大学高等研究院, 北京 100084)

(2015年5月26日收到; 2015年6月30日收到修改稿)

费米子符号在费米液体理论中至关重要. 然而, 在 Mott 绝缘体中, 很强的电子 Coulomb 相互作用抑制了体系的电荷涨落并消除了电子交换带来的费米子符号问题. 本文首先回顾二分晶格上 Hubbard 模型的相位弦理论, 从弱关联的费米液体到强关联的反铁磁 Mott 绝缘体的转变可以由此得到统一理解. 在任意 Coulomb 作用强度 U 下, 我们首先导出 Hubbard 模型的严格的符号结构. 在小 U 极限下, 它回到通常的费米子符号; 在大 U 极限下, 它给出了 t - J 模型的相位弦符号. 在半满情形下, 我们构造了一种电子分数化的表象, 其中, 电荷子与自旋子通过演生的交互 Chern-Simons 规范场相互耦合. 由此导出的基态波函数拟设与低能有效理论可以定性刻画 Hubbard 模型的基态相图. 在弱关联区域, 费米液体的准粒子由电荷子与自旋子的束缚态构成, 其长程相位相干性取决于背景自旋的关联性质. 体系的 Mott 转变可以通过电荷子打开能隙或是通过自旋子玻色凝聚来实现.

关键词: Hubbard 模型, Mott 转变, 相图, 符号结构

PACS: 71.10.Fd, 71.10.Hf, 71.30.+h, 75.10.Kt

DOI: 10.7498/aps.64.217101

1 引言

能带理论与费米液体图像是传统凝聚态物理的基石. 在固体晶格的周期势场中, 无相互作用电子的能级形成能带, 电子自能带底向上填充至材料的化学势 (费米能). 根据能带填充的情况, 材料可以分成绝缘体 (只有完全填满和未填充的能带, 电子的激发要跨越有限的带隙) 和金属 (存在未填满的能带, 费米面附近的电子激发无能隙), 其中, 金属的低能激发态为费米面附近的电子-空穴对. 电子间的相互作用只会定量地修改无相互作用电子气的结果, 可以用微扰论处理. 尤其重要的是, 材料中的准粒子激发态与电子气中的单电子态一一对应. 能带理论可以解释很多固体材料的物理性质.

然而, 一些过渡金属化合物, 如 MnO, FeO, CoO, NiO 等却不符合能带理论的预言. 根据能带理论, 这些材料都有未填满的能带, 应该是金属; 实验却发现它们在低温下是绝缘体. 1949年, Mott 指出, 这是电子间的相互作用导致的^[1]. 因此, 这类材料被称为 Mott 绝缘体. 考虑到电子相互作用, 最简单的模型是 Hubbard 模型^[2]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

其中 $c_{i\sigma}$ 为电子算符, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ 为电子数算符, H.c. 代表算符的 Hermite 共轭. (1) 式的第一项描写电子在格点间的跃迁, 来自近邻格点上的电子波函数的交叠积分; 第二项描写电子的相互作用, 来自电子的 Coulomb 排斥势. 两个电子占据同一个格点时要消耗额外的能量 U . 在半满情形, 即平均每个格点有一个电子时, 由于过渡金属离子的 d 电子

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2010CB923003) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: weng@tsinghua.edu.cn

轨道非常局域, 格点间的轨道交叠积分 $t \ll U$, (1) 式中的相互作用项占主导, 任何格点上都不允许占据两个电子. 为了满足这样的单占据约束, 电子被分别局域在每个离子格点上, 不能在格点间自由跃迁, 因此材料在低温下成为绝缘体*. 电子在近邻格点间的虚跃迁过程导致格点上的局域自旋磁矩之间有反铁磁交换作用, 使得材料在低温下形成长程反铁磁序, 这被中子衍射实验证实^[3]. $U \ll t$ 时, (1) 式回到无相互作用电子的紧束缚模型, 在半满情形下成为金属态. 因此, 减小哈密顿量中的 U/t 会在 Mott 绝缘体中具有反铁磁关联的局域自旋背景上逐渐引入电荷涨落, 并最终导致 Mott 绝缘体到金属的转变. 如图 1 所示. 如何描写这种电荷涨落的效应, 从而理解任意耦合强度的 Hubbard 模型的物理性质并刻画 Mott 转变点附近的物理性质是凝聚态理论的重要问题.

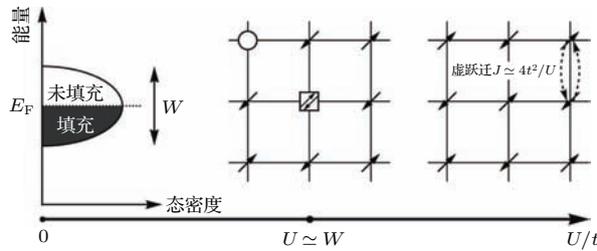


图 1 半满 Hubbard 模型的示意相图. $U/t \rightarrow 0$ 时, 能带半填充, 系统处于金属态; $U/t \gg 1$ 时, 系统为反铁磁 Mott 绝缘体; $U \simeq W$ (W 为能带宽度) 时, 电荷涨落导致系统发生 Mott 转变

Fig. 1. Schematic phase diagram of half-filled Hubbard model. As $U/t \rightarrow 0$, the energy band is half-filled and the system is metallic. As $U/t \gg 1$, the system is an antiferromagnetic Mott insulator. When $U \simeq W$ (W is the band width), charge fluctuations lead to Mott transition.

传统费米液体理论中巡游的电子准粒子图像不能刻画(掺杂)Mott 绝缘体中的局域自旋. 理论上一种常用的图像是自旋—电荷分离, 认为系统的低能激发是不带电荷的自旋子 (spinon) 与不带自旋的电荷子 (chargon)^[4,5]. 二者均为非局域的电子集体激发, 但它们携带的守恒量子数只相当于电子的一部分, 因此, 这一图像也称为“电子分数化”. 数学上, 电子分数化通常用辅助粒子 (slave particle) 技术引入^[5]: 将电子算符分解为自旋子算符与电荷子算符的乘积, 电子的态空间也相应地扩大为自旋子与电荷子的态空间, 而物理的态空间通过投影算

符得到. 然而, 电子算符的辅助粒子分解形式并不唯一, 自旋子与电荷子的量子统计性质在不同分解形式中也可以完全不同. 每种电子分数化方案都给出不同的平均场解, 只有通过投影算符引入规范涨落才能使之成为物理态, 然而, 这种规范涨落可能是不可控的, 可能破坏平均场基态的稳定性. 因此, 为了研究多体系统的基态性质, 我们需要找到合适的电子分数化方案.

大 U/t 极限下, 对于掺杂的 (即非半满的) Mott 绝缘体, Hubbard 模型约化为 t - J 模型. 在二分 (bipartite) 晶格上, 吴恺等^[6] 证明了 t - J 模型哈密顿量的符号结构 (sign structure) 与无相互作用的电子气完全不同: 单占据约束大大地“稀释”了电子气的费米子符号, 系统的符号问题主要来自相位弦效应, 即电荷子与自旋子交换引起的符号. 考虑到这个效应, 相位弦理论构造了恰当的电子分数化方案^[7-9]. 半满情况下, 电荷涨落被完全抑制, 电子的费米子符号完全不起作用, 哈密顿量没有符号问题. Heisenberg 模型的基态可以用 Schwinger 玻色子平均场理论刻画^[10,11]. 这表明, 在多体系统中, 恰当的电子分数化形式与相互作用哈密顿量的符号结构有密切的联系.

对于任意相互作用强度 U/t 的 Hubbard 模型, 我们在文献^[12] 文中研究了它的符号结构, 发现相应的符号结构可以严格表达为电子分数化得到的电荷子与自旋子之间的交互统计. 据此, 我们提出了一种电子分数化表象, 其中的基态波函数拟设可以描写任意 U/t 下的物理性质.

2 Hubbard 模型的符号结构

在研究一般情形之前, 我们先来考察 Hubbard 模型在半满情形下的大 U/t 极限, 即 Heisenberg 模型, 由此我们可以深入理解“符号结构”的涵义.

2.1 Heisenberg 模型的符号结构

电子半填满且 $U/t \gg 1$ 时, 每个格点都有且仅有一个电子, 相应的自旋是仅有的低能自由度. 电子的虚跃迁过程导致自旋的反铁磁 Heisenberg 交换作用:

$$H_J = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2)$$

*MnO 等材料中, 平均每个格点上有 (整数) 多个电子. 格点上额外占据一个电子消耗的排斥能远大于电子在格点间的跃迁能, 材料也成为 Mott 绝缘体.

其中, 交换作用的强度 $J = 4t^2/U$.

Schwinger 玻色子 (Schwinger boson, SB) 与 Schwinger 费米子 (Schwinger Fermion, SF) 是两种常用的自旋表象. 在 SB(SF) 表象中, $S_i = \frac{1}{2}b_i^\dagger \sigma b_i$, $b_i = (b_{i\uparrow}, b_{i\downarrow})^T$ 为玻色型 (费米型) 自旋子算符, σ 为 Pauli 矩阵. 在单占据约束下, 两种表象都严格给出自旋算符的代数关系.

然而, 两种表象得到的平均场态有很大不同. 在二分晶格上, Schwinger 玻色子平均场基态有长程反铁磁序, 可以很好地描写 H_J 基态的自旋关联性质 [11,10,13,14]. Schwinger 费米子平均场理论给出 π -磁通态 [15,16], 它的自旋关联函数随距离增加而幂次衰减. 只有考虑到单占据约束引入的规范涨落后, 交错 (staggered) 自旋关联结构因子才会发散 [17].

为什么两种表象下平均场基态的自旋关联如此不同呢? 单占据投影去除了每种表象下的非物理的态, 那么, 为什么在费米子表象下投影作用如此重要, 而玻色子表象下则显得不太重要呢?

在二分晶格上, 我们采用 Schwinger 玻色子表象下的旋转 Ising 基 [18]: $b_{i\sigma} \mapsto (-\sigma)^i b_{i\sigma}$. 其中, $i \in A$ 子格时, $(-\sigma)^i = 1$, $i \in B$ 子格时, $(-\sigma)^i = -\sigma$. 在这组基下, Heisenberg 模型 (2) 表示为

$$H_J = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle ij \rangle} (b_{i\uparrow}^\dagger b_{j\downarrow}^\dagger b_{i\downarrow} b_{j\uparrow} + b_{i\downarrow}^\dagger b_{j\uparrow}^\dagger b_{i\uparrow} b_{j\downarrow}) + H_{\text{dt}} \equiv H_{\uparrow\downarrow} + H_{\text{dt}}. \quad (3)$$

H_{dt} 表示 Ising 基 $\{|\alpha\rangle = b_{i_1\uparrow}^\dagger \cdots b_{i_M\uparrow}^\dagger b_{j_1\downarrow}^\dagger \cdots b_{j_{N-M}\downarrow}^\dagger |0\rangle\}$ 下的对角项. 其中, M 表示上自旋总数, N 为格点总数. 对配分函数做高温展开到无穷多阶, 并插入利用 Ising 基构造的单位算符 $\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$, 得到 [6]

$$\mathcal{Z} = \text{tre}^{-\beta H_J} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \sum_{\alpha_i} \prod_{i=0}^{n-1} \langle \alpha_{i+1} | (-H_J) | \alpha_i \rangle, \quad (4)$$

其中, $|\alpha_n\rangle = |\alpha_0\rangle$, 即所有粒子的运动都必须构成闭合路径. 配分函数成为关于这些回路 c 的求和:

$$\mathcal{Z} = \sum_c W_J[c], \quad W_J[c] \geq 0. \quad (5)$$

(5) 式中每一项的贡献都是正的, 这是因为哈密顿量 (3) 中所有的非对角项都是负的, 而对角项不会影响符号结构 (严格证明见文献 [12]).

在费米子表象下, 可以导出类似的表达式

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{c\}} (-1)^{P_\uparrow[c] + P_\downarrow[c]} W_J[c], \quad W_J[c] \geq 0. \quad (6)$$

其中, $P_\sigma[c]$ 是自旋为 σ 的电子在闭合回路 c 中置换的奇偶性, 它来源于该表象的费米子符号. $W_J[c]$ 与玻色子表象下的 (5) 式相同.

平均场理论取消了严格的单占据约束, 代之以平均粒子数的限制, 因此扩大了态空间. 这种情况下, (5) 式与 (6) 式的符号结构有很大不同. (6) 式中的费米子符号造成不同粒子路径之间的相消干涉, 因此, 平均场基态的自旋结构因子不发散. 在玻色子表象下, 没有费米子符号问题, 所有闭合路径都相长干涉, 这导致自旋结构因子发散, 基态具有长程反铁磁序.

然而, 在严格的单占据约束下, 粒子的置换只能通过逐对交换实现. 因此, 每个闭合路径中粒子置换的奇偶性与总交换次数的奇偶性相同: $(-1)^{S_{\uparrow\downarrow}[c]} = (-1)^{P_\uparrow[c] + P_\downarrow[c]}$. 其中, $S_{\uparrow\downarrow}[c]$ 表示上自旋与下自旋之间的交换次数. 在二分晶格上, 每次交换都会使一个子格上的上自旋总数增减 1, 因此, 一个闭合路径完成后, 必须满足 $S_{\uparrow\downarrow}[c] \equiv 0 \pmod{2}$. 所以, 所有闭合路径的贡献都是正的. 因此, Schwinger 玻色子表象与严格投影条件下的符号结构是一致的. 自旋子在基态玻色凝聚, 具有长程反铁磁序 [13,14].

通过考察 Heisenberg 模型中的两种表象, 我们看到, 态空间的投影可以引起粒子的统计嬗变, 与基态性质相符的粒子统计可能与采用的辅助粒子表象不一致. 尽管 Schwinger 玻色子与费米子两种表象在严格的单占据约束下等价, 在扩大的平均场态空间中, 它们却给出不同的平均场基态. 因此, 为了正确刻画系统基态的物理性质, 我们应选择合适电子分数化方案, 这要求我们仔细研究系统的符号结构.

2.2 Hubbard 模型的符号结构

我们接下来导出任意耦合强度的 Hubbard 模型的符号结构, 其物理涵义将在第 3 节中讨论. 下文中, 我们采用辅助费米子表象 [19]. 辅助玻色子表象也可以导出同样的符号结构 [12], 因此符号结构是与表象无关的系统的内禀性质.

在辅助费米子表象中, 单占据格点以自旋子表示, 双占据格点与无占据格点分别以双占据态

(doublon) 与空穴子 (holon) 表示 [二者统称为电荷子 (chargon)]:

$$c_{i\uparrow}^\dagger|0\rangle \mapsto (-1)^i b_{i\uparrow}^\dagger|0\rangle, \quad c_{i\downarrow}^\dagger|0\rangle \mapsto b_{i\downarrow}^\dagger|0\rangle, \quad (7)$$

$$c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger|0\rangle \mapsto (-1)^i d_i^\dagger|0\rangle, \quad |0\rangle \mapsto h_i^\dagger|0\rangle. \quad (8)$$

电子算符表示为

$$c_{i\sigma} = (-\sigma)^i (h_i^\dagger b_{i\sigma} + \sigma b_{i-\sigma}^\dagger d_i). \quad (9)$$

费米型的电荷子 d_i 与 h_i 与玻色型的自旋子 $b_{i\sigma}$ 在如下粒子数约束下,

$$\sum_{\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} + d_i^\dagger d_i + h_i^\dagger h_i = 1, \quad (10)$$

给出的 $c_{i\sigma}$ 满足电子的费米子代数. (9) 式中, $(-1)^i$ 为二分晶格上的 Marshall 符号 [18].

将 (9) 式代入哈密顿量 (1) 中, 得到

$$\begin{aligned} H_t = & -t \sum_{\langle ij \rangle} \left[\sum_{\sigma} (b_{i\sigma}^\dagger b_{j-\sigma}^\dagger h_i d_j + b_{j\sigma}^\dagger b_{i-\sigma}^\dagger h_j d_i) \right. \\ & + (b_{i\uparrow}^\dagger b_{j\uparrow}^\dagger d_j^\dagger d_i + b_{i\uparrow}^\dagger b_{j\uparrow}^\dagger h_j^\dagger h_i) \\ & \left. - (b_{i\downarrow}^\dagger b_{j\downarrow}^\dagger d_j^\dagger d_i + b_{i\downarrow}^\dagger b_{j\downarrow}^\dagger h_j^\dagger h_i) \right] + \text{H.c.} \\ \equiv & -t \sum_{\langle ij \rangle} (P_{ij} + E_{ij}^\uparrow - E_{ij}^\downarrow) + \text{H.c.} \quad (11) \end{aligned}$$

其中, P_{ij} 项湮没一对电荷子并产生一对自旋子, E_{ij}^σ 项将一个自旋 σ 的自旋子与其最近邻格点上的电荷子交换 (如图 2 所示). U 项表示为

$$\begin{aligned} H_U = & U \sum_i d_i^\dagger d_i \\ = & \frac{1}{2} U \sum_i (d_i^\dagger d_i + h_i^\dagger h_i) + \frac{1}{2} U (N_e - N). \quad (12) \end{aligned}$$

其中, N_e 代表电子总数, N 为格点数,

$$N_e - N = \sum_i (d_i^\dagger d_i - h_i^\dagger h_i). \quad (13)$$

H_U 在用粒子占据数标记的基

$$\left\{ d_{i_1}^\dagger \cdots h_{m_1}^\dagger \cdots b_{i_1\uparrow}^\dagger \cdots b_{j_1\downarrow}^\dagger \cdots |0\rangle \right\} \quad (14)$$

下是对角项, H_t 为非对角项.

用第 2.1 节中的推导方法, 将配分函数展开成关于粒子闭合路径的求和. 展开式中每项的负号来自非对角项 $-tE_{ij}^\downarrow$ 以及双占据态与空穴子的费米子符号. 配分函数可以表示为

$$\mathcal{Z} = \sum_c (-1)^{N[c]} W_H[c], \quad W_H[c] \geq 0. \quad (15)$$

符号因子为

$$(-1)^{N[c]} = (-1)^{P_d[c]+P_h[c]+S_{d\downarrow}[c]+S_{h\downarrow}[c]}. \quad (16)$$

其中, $P_{d(h)}[c]$ 表示双占据态 (空穴子) 之间置换的奇偶性, 来源于它们的费米统计; $S_{d(h)\downarrow}[c]$ 代表双占据态 (空穴子) 与自旋向下的自旋子之间的交换次数, 来源于 $-tE_{ij}^\downarrow$ 项. 在闭合路径中, 空穴子与双占据态之间的交换数总是偶数, 因此不会影响 (16) 式中的符号.

(15) 式中, 每个闭合路径 c 贡献的求和权重为

$$W_H[c] = (\beta t)^{N_t[c]} F_{N_t[c]}(-n_0 \beta U, -n_1 \beta U, \dots, -n_{N_t[c]} \beta U). \quad (17)$$

其中, $N_t[c]$ 是 H_t 作用的总次数. F_k 是一个正定的多变量函数, 代表来自对角项 H_U 的贡献. $n_i (i = 0, 1, \dots, N_t[c])$ 是 $|\alpha_i\rangle$ 中双占据态的数目.

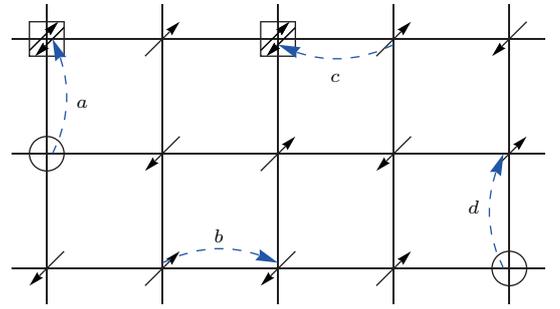


图 2 哈密顿量的动能项 (11) 表示的粒子运动. 虚线箭头代表电子的跃迁. (a, b) H_t 产生或消灭一对电荷子; (c, d) H_t 引起一个双占据或一个空穴子的跃迁

Fig. 2. The elementary processes introduced by the kinetic term in Eq. (11). The dashed arrows indicate the hopping of electrons. (a, b) H_t creates or annihilates a chargeon pair. (c, d) H_t moves a doublon or a holon.

2.2.1 大 U/t 极限

半满情形 半满情况下, $N_e = N$, $\sum_i (d_i^\dagger d_i - h_i^\dagger h_i) = 0$. $U/t \gg 1$ 时, 由于双占据态消耗很大的能量, $\sum_i (d_i^\dagger d_i + h_i^\dagger h_i) \rightarrow 0$. 因此, 配分函数 (15) 中, 包含了空穴子或双占据态的闭合路径的权重 $W_H[c]$ 趋于零. 具有非零权重的路径都满足

$$N[c] = P_d[c] + P_h[c] + S_{d\downarrow}[c] + S_{h\downarrow}[c] = 0. \quad (18)$$

因此, 我们回到了第 2.1 节所证明的 Heisenberg 模型没有符号问题的结论.

有限掺杂的情形 由于粒子—空穴对称性, 我们只需讨论空穴掺杂的情形. $U/t \gg 1$ 时, 系统中没有双占据态, $\sum_i d_i^\dagger d_i \rightarrow 0$, 符号结构简化为

$$N[c] = P_h[c] + S_{h\downarrow}[c]. \quad (19)$$

这正是 t - J 模型的符号结构 [6]. 电子掺杂的体系中, 只要在 (19) 式中将下标 h 换为 d 即可.

单空穴掺杂的情形 t - J 模型中, 只有一个空穴时, 符号结构(19)进一步简化为

$$N[c] = S_{h\downarrow}[c]. \quad (20)$$

由此看出, 空穴在自旋背景下跃迁时会产生一串正负号的相位“尾迹”, 称为相位弦. 这些符号是由自旋位形决定的. 系统有长程反铁磁序时, 低能自旋激发使得自旋翻转很容易发生, 空穴子不同的跃迁路径的相消干涉导致它的准粒子权重为零 [7,8], 系统基态是非费米液体. 相位弦理论预言掺入的空穴会自发局域化 (self-localized) [20]. 朱征等用密度矩阵重整化群 (density matrix renormalization group, DMRG) 数值计算验证了单空穴掺杂的 t - J 模型中的电荷局域化 [21]. 在偶数条链的准一维格子上, t - J 模型有非零的自旋能隙, DMRG 计算仍然得到了电荷局域化的行为. 这表明, 即使在自旋能隙有限的情形, 相位弦效应也会通过粒子路径的相消干涉影响长距离的低能物理性质.

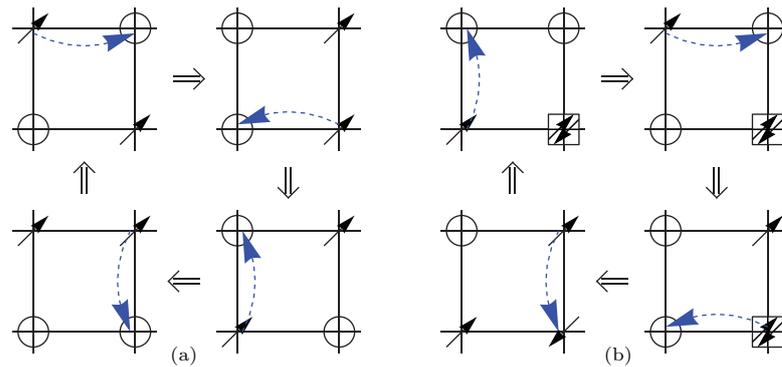


图3 (a) 两个自旋向上的电子的置换导致了两个空穴的置换. 因此, $P_{\uparrow}^e[c] = P_h[c] = 1$; (b) 在辅助费米子表象中, 该过程包含了两个空穴子的置换, $P_h[c] = 1$. 在电子表象中, $P_{\uparrow}^e[c] = 1$

Fig. 3. (a) The exchange of two spin- \uparrow electrons induces the exchange of two holes, thus $P_{\uparrow}^e[c] = P_h[c] = 1$; (b) in terms of partons, the process involves the exchange of two holons, $P_h[c] = 1$, while in terms of electrons, $P_{\uparrow}^e[c] = 1$.

因此, 弱耦合情形下, 利用(21)式, 我们自然地得到了电子表象中的费米子符号结构. 在 $U/t \gg 1$ 的强耦合极限下, 由于单占据约束, (19)式表述的符号结构是不可约的. 半满时, 它进一步退化到没有符号问题. 这个形式与弱耦合区域的费米子符号(21)有很大区别: 这种情形下, 费米子符号完全变成非物理的, 应通过严格的单占据投影消除掉. 换句话说, 在大 U/t 极限下, 如果采用电子表象, 非物理的费米子符号就会导致极大的困难. 在 U/t 中等大小的 Hubbard 模型中, 如何构造合适的电子分数化方案也与恰当地处理符号结构(16)紧密联系在一起.

2.2.2 小 U/t 极限

小 U/t 极限下, 弱耦合的电子系统形成费米液体, 其符号结构应该等价于通常的费米子符号. 这种情况下, 电子-空穴对没有能隙, 可以大量地产生和湮没, 因此, 电子表象没有辅助费米子表象下的非物理态, 显得更加方便. 可以证明, (16)式的符号结构等价于电子表象中的费米子符号 [12]

$$(-1)^{N[c]} = (-1)^{P_{\uparrow}^e[c] + P_{\downarrow}^e[c]}. \quad (21)$$

其中, $P_{\sigma}^e[c]$ 是自旋 σ 的电子之间的置换的奇偶性, 为通常的费米子符号. (21)式的严格证明参见文献 [12], 这里我们举两个例子来直观说明. 图3(a)为两个自旋向上的电子的置换. 图3(b)包含了自旋子的跃迁以及空穴子—双占据态对的产生与湮没的过程, 在电子表象中, 则可以方便地用两个电子置换的费米子符号来表达. 两个过程中, (21)式两端用两种表象得到的正负号都是一致的.

一起, 这是我们接下来要研究的问题.

3 基态波函数拟设

Hubbard模型的符号结构(16)随 U/t 增大逐渐偏离无相互作用的费米子符号, 变得更加稀疏. 在半满情形的大 U/t 极限下, 电荷涨落被完全抑制, 费米子符号问题完全消失, 其基态波函数可以用 Schwinger 玻色子平均场基态刻画. 我们在本节中研究在任意的 U/t 下如何利用符号结构来构造恰当的基态波函数拟设.

3.1 基态波函数的符号结构

基态波函数 $|\Psi_G\rangle$ 与符号结构有密切的联系. 首先, 我们可以证明 [6]:

$$\begin{aligned} & \langle \alpha | \Psi_G \rangle \langle \Psi_G | \alpha \rangle \\ & \propto \sum_{c(\alpha, \alpha)} (-1)^{N[c(\alpha, \alpha)]} W[c(\alpha, \alpha)], \\ & W[c(\alpha, \alpha)] \geq 0. \end{aligned} \quad (22)$$

其中, $|\alpha\rangle$ 态是一个任意的粒子位形, 求和包括所有从 $|\alpha\rangle$ 态出发的闭合路径 $c(\alpha, \alpha)$.

任取两个态 $|\alpha\rangle$ 与 $|\alpha'\rangle$, 利用高温展开得到

$$\begin{aligned} & \langle \alpha' | e^{-\beta H} | \alpha \rangle \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \sum_{\alpha_i} \prod_{i=0}^{n-1} \langle \alpha_{i+1} | (-H) | \alpha_i \rangle \\ & = \sum_{c(\alpha, \alpha')} (-1)^{N[c(\alpha, \alpha')]} W[c(\alpha, \alpha')]. \end{aligned} \quad (23)$$

其中, $W[c(\alpha, \alpha')] \geq 0$, $|\alpha_0\rangle = |\alpha\rangle$, $|\alpha_n\rangle = |\alpha'\rangle$. (23) 式中的符号定义为

$$\begin{aligned} & (-1)^{N[c(\alpha, \alpha')]} \\ & \equiv \text{sgn}(\langle \alpha_n | (-H_t) | \alpha_{n-1} \rangle \cdots \langle \alpha_1 | (-H_t) | \alpha_0 \rangle). \end{aligned} \quad (24)$$

$\beta \rightarrow \infty$ 时, (23) 式左边化为

$$\langle \alpha' | e^{-\beta H} | \alpha \rangle \rightarrow e^{-\beta E_G} \langle \alpha' | \Psi_G \rangle \langle \Psi_G | \alpha \rangle. \quad (25)$$

其中, E_G 为基态能量. 由此得到

$$\begin{aligned} & \langle \alpha' | \Psi_G \rangle \langle \Psi_G | \alpha \rangle \rightarrow \\ & e^{\beta E_G} \sum_{c(\alpha, \alpha')} (-1)^{N[c(\alpha, \alpha')]} W[c(\alpha, \alpha')]. \end{aligned} \quad (26)$$

取 $|\alpha'\rangle = |\alpha\rangle$, 就得到了 (22) 式.

因此, Hubbard 模型的符号结构 $(-1)^{N[c]}$ 出现在基态波函数的表达式 (26) 中. 用类似的方法, 我们可以证明它也出现在系统的各种关联函数中, 造成不同路径间的相消干涉. 当 $|\alpha\rangle$ 态中的粒子沿闭合路径 $c(\alpha, \alpha)$ 运动时, (22) 式中的符号因子与时间无关, 因此可以看作一种 Berry 相位. $N[c]$ 只与自旋子和电荷子的交换次数的奇偶性有关, 因此, 符号结构不是依赖于路径的几何相位, 而是一个拓扑相位, 反映了自旋子与电荷子之间的演生的量子统计. 由于统计相位的奇异性, 与费米液体中的费米子符号一样, 它不能用微扰论处理, 必须作为构造波函数拟设所需满足的前提条件加以考虑.

3.2 半满情形的波函数拟设

强耦合极限下, 半满的 Hubbard 模型约化为 Heisenberg 模型, 系统基态可以由 Liang-Doucot-Anderson 玻色共振价键态 (resonating valence bond, RVB) [22] 刻画. 在 Schwinger 玻色子表象下, 玻色 RVB 态 $|b\text{-RVB}\rangle$ 表示为

$$|b\text{-RVB}\rangle = \hat{P}_s |\Phi_b\rangle. \quad (27)$$

其中,

$$|\Phi_b\rangle = \exp\left(\sum_{ij} W_{ij} b_{i\uparrow}^\dagger b_{j\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (28)$$

代表 b -自旋子形成单态配对, 配对振幅为 W_{ij} . 投影算符 \hat{P}_s 保证单占据条件: $\sum_{\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} = 1$. $|\Phi_b\rangle$ 可以看作 Schwinger 玻色子的平均场基态. i 和 j 属于不同的子格时, $W_{ij} \propto |i-j|^{-3}$; 否则, $W_{ij} = 0$. $|b\text{-RVB}\rangle$ 可以精确描写 Heisenberg 模型的基态 [22]. $|b\text{-RVB}\rangle$ 也可以用电子算符表示 [9]:

$$|b\text{-RVB}\rangle = \sum_{\{\sigma_s\}} \Phi_{\text{RVB}}(\{\sigma_s\}) c_{1\sigma_1}^\dagger c_{2\sigma_2}^\dagger \cdots c_{N\sigma_N}^\dagger |0\rangle. \quad (29)$$

其中, 对于给定的自旋构型 $\{\sigma_s\} = \sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N$, $\Phi_{\text{RVB}}(\{\sigma_s\}) = \sum \prod_{(ij)} (-1)^i W_{ij}$. (29) 式中的求和包括格子上所有的 RVB 构型.

$b_{i\sigma}^\dagger$ 为玻色子算符, Marshall 符号 $(-1)^i$ 在闭合路径中没有贡献, 因此, $|b\text{-RVB}\rangle$ 不包含统计符号. 对于 t - J 模型, 翁征宇构造了满足其符号结构的基态波函数拟设 [9]. 我们考虑将其推广到任意 U/t 的 Hubbard 模型, 构造相应的波函数拟设.

对半满的 Hubbard 模型, 我们构造如下的基态拟设:

$$|\Psi_G\rangle = C e^{\hat{D}} |b\text{-RVB}\rangle. \quad (30)$$

其中, C 是归一化因子, \hat{D} 代表电荷涨落产生的双占据态—空穴子对, 它保证了半满情形的电中性:

$$\hat{D} = \sum_{ij, \sigma} D_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d (\hat{c}_{j\sigma})_h e^{i(\Omega_i - \Omega_j)}. \quad (31)$$

投影电子算符 $(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d$ 与 $(\hat{c}_{j\sigma})_h$ 作用在自旋 RVB 背景 $|b\text{-RVB}\rangle$ 上分别产生双占据与空穴态:

$$(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d |b\text{-RVB}\rangle = c_{i\sigma}^\dagger |b\text{-RVB}\rangle, \quad (32)$$

$$(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d | \text{非单占据态} \rangle = 0; \quad (33)$$

$$(\hat{c}_{j\sigma})_h |b\text{-RVB}\rangle = c_{j\sigma} |b\text{-RVB}\rangle, \quad (34)$$

$$(\hat{c}_{j\sigma})_h | \text{非单占据态} \rangle = 0. \quad (35)$$

$(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d$ 与 $(\hat{c}_{j\sigma})_h$ 反对易: $\{(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d, (\hat{c}_{j\sigma})_h\} = \{(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d, (\hat{c}_{j\sigma})_d\} = \{(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_h, (\hat{c}_{j\sigma})_h\} = 0$. 因此, 电荷子之间的交换产生相应的费米子符号: $(-1)^{P_d[c]+P_h[c]}$.

(31) 式中, 符号结构中最奇异的相位弦符号体现在电荷涨落引入的相移因子 $e^{i(\hat{\Omega}_i - \hat{\Omega}_j)}$ 中. 它的定义为

$$\hat{\Omega}_i = \frac{1}{2} \sum_{l \neq i} \theta_i(l) (n_{l\uparrow}^b - n_{l\downarrow}^b - 1). \quad (36)$$

其中, $\theta_i(l) = \arg(z_i - z_l)$, 表示从 l 格点到 i 格点的矢量的极角. 由于 $|b\text{-RVB}\rangle$ 是半满的波函数, $n_{i\uparrow}^b - n_{i\downarrow}^b - 1 = -2n_{i\downarrow}^b$. 一个电荷子从 i 移动到 i' 时, 相位因子 $\hat{\Omega}_i$ 增加 $-\sum_l n_{l\downarrow}^b (\theta_i(l) - \theta_{i'}(l))$. 其中, 每个自旋向下的格点 l 贡献 $\theta_{i'}(l) - \theta_i(l)$, 即电荷子运动时, 从 l 到 i 的矢量扫过的角度. 电荷子走过一个闭合回路时, 位于回路外的自旋向下的格点贡献相移为 0, 位于回路内的自旋向下的格点贡献为 2π , 都没有物理效应. 然而, 当一个自旋向下的格点位于回路上时, 它与电荷子发生交换, 贡献为 $\pm\pi$. 因此, 计算 $e^{i(\hat{\Omega}_i - \hat{\Omega}_j)}$ 中的 Berry 相位就可以得到符号结构 (16) 中的相位弦因子 $(-1)^{S_{d\downarrow}[c]+S_{h\downarrow}[c]}$. 所以, 基态波函数拟设 (30) 严格满足 Hubbard 模型的符号结构.

波函数拟设 (30) 可以看作 Hubbard 模型的一类变分波函数. 电荷涨落的幅度 D_{ij} 与 RVB 配对的幅度 W_{ij} 是变分参数. 由于符号结构中最奇异的相位已经用 (31) 式中的相移因子表达, 上述变分参数是光滑的函数, 适合做变分计算.

在强耦合区域, 空穴子—双占据态对是虚激发. 每对中的电荷子都被禁闭在短距离内, 体系是 Mott 绝缘体. 电荷涨落的幅值 D_{ij} 随距离 $|i - j|$ 指数衰减. 长波极限下, $e^{\hat{D}} \sim 1$, $|\Psi_G\rangle \sim |b\text{-RVB}\rangle$. 因此, 电荷涨落对 $|b\text{-RVB}\rangle$ 中的自旋关联影响很小, 系统仍然有长程反铁磁序.

$U/t \rightarrow 0$ 时, 电荷涨落大量产生, 并在空间中相互交叠. 空穴子—双占据态对可以分解为单独的电荷激发: 长程下, 电荷涨落的幅值 $D_{ij} \sim g_i g_j$, 空穴子与双占据态成为良好的费米型单粒子激发. 与此同时, b -自旋子形成短程 RVB 态, 自旋激发产生能隙. 在远大于 RVB 配对的尺度上, 相移因子 $\hat{\Omega}_i$ 相互抵消, $e^{i\hat{\Omega}_i} \sim O(1)$, 费米型的电荷激发可以相位相干地传播, 成为巡游电子, 系统成为巡游的费米液体. 在某些晶格上, 费米面可能发生嵌套

(nesting) 而在相互作用下失稳, 所以 D_{ij} 也可能代表自旋密度波态 (Spin Density Wave, SDW).

4 电子分数化与演生规范场

在基态波函数拟设 (30) 中, 自旋关联由背景 RVB 态 $|b\text{-RVB}\rangle$ 决定. 自旋磁矩形成从 A 子格到 B 子格的自旋单态. 然而, 电荷子跃迁时, 必须有一个自旋子反向跃迁到原格点, 因此, 自旋关联也受到电荷子运动的影响, 这一效应并未包含在 $|b\text{-RVB}\rangle$ 拟设中. 另一方面, 为了表达相位弦相位, 拟设 (30) 中的相移因子 $\hat{\Omega}_i$ 要求区分背景 RVB 中的自旋关联与电荷涨落引起的自旋关联. 因此, 我们引入一种“回流”(backflow) 自旋子 $a_{i\sigma}^\dagger$. a -自旋子位于电荷子的格点上, 与电荷子一起跃迁, 它的自旋量子数与同一格点上的背景 b -自旋子相反, 从而保证该格点上的总自旋为零. 对于 t - J 模型, 文献 [9] 中证明了如此引入的回流自旋子具有费米统计. 这样一来, 自旋的 RVB 配对与回流运动分别体现在两种自旋子的关联中. 这种电子分数化方案是 Hubbard 模型中奇异的符号结构要求的.

4.1 电子分数化表象

在 (32)—(35) 式中, 引入投影电子算符的分解形式:

$$(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger)_d = \hat{P} \sigma d_i^\dagger a_{i\sigma}^\dagger e^{-i\hat{\Omega}_i} (-\sigma)^i, \quad (37)$$

$$(\hat{c}_{i\sigma})_h = \hat{P} h_i^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger e^{i\hat{\Omega}_i} (-\sigma)^i. \quad (38)$$

它们作用在背景 RVB 态 $|b\text{-RVB}\rangle$ 上. 其中, d_i^\dagger (h_i^\dagger) 为玻色型的双占据态(空穴子)产生算符, $a_{i\sigma}^\dagger$ 为费米型的自旋子产生算符. $a_{i\sigma}^\dagger$ 的自旋总是与该格点上的 b -自旋子相反, 保证电荷子格点为总自旋单态 [9]. (37) 与 (38) 式中引入了投影算符 \hat{P} 来保证 (33) 与 (35) 式中的粒子数约束, 其精确定义将在后文中给出. 因子 $(-\sigma)^i$ 来源于 $|b\text{-RVB}\rangle$ 中的 Marshall 符号.

利用这个分解形式, 波函数拟设 (30) 中的相移因子被抵消, 成为三种粒子的直积态的投影:

$$|\Psi_G\rangle = \hat{P} |\Phi_c\rangle \otimes |\Phi_a\rangle \otimes |\Phi_b\rangle. \quad (39)$$

$|\Phi_c\rangle$ 为电荷子的波函数, 描写电荷子成对产生的过程:

$$|\Phi_c\rangle = e^{\sum_{ij} G_{ij} h_i^\dagger d_j^\dagger} |0\rangle. \quad (40)$$

相应地, 回流自旋子 $a_{i\sigma}$ 也成对产生:

$$|\Phi_a\rangle = e^{\sum_{ij\sigma} g_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j-\sigma}^\dagger} |0\rangle. \quad (41)$$

其中, $D_{ij} = G_{ij}g_{ij}$. 背景自旋子形成玻色 RVB 态, 即 (28) 式中的 $|\Phi_b\rangle$.

投影算符定义为 $\hat{P} = \hat{P}_B \hat{P}_s$. 其中, \hat{P}_s 保证背景 RVB 态的单占据约束: $\sum_{\sigma} n_{i\sigma}^b = 1$; \hat{P}_B 保证每个电荷子格点上的 a -自旋子与 b -自旋子的自旋总是相互抵消:

$$n_{i\sigma}^a = n_i^c n_{i-\sigma}^b, \quad (42)$$

其中, $n_{i\sigma}^a = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$, $n_i^c = n_i^h + n_i^d$ 为电荷子总数.

原来的波函数拟设 (30) 中出现的奇异的相因子在新的电子分数化表象中被吸收到了回流自旋子 $a_{i\sigma}$ 的定义中. 波函数拟设成为三个子体系, 即电荷子, 回流自旋子 $a_{i\sigma}$ 与背景自旋子 $b_{i\sigma}$ 态的直积, 每一个子体系都更容易理解. 波函数拟设中包含三组参数: G_{ij} , g_{ij} 与 W_{ij} , 可以用变分计算或平均场近似得到.

4.2 符号结构与演生规范场

本小节中, 我们将从辅助费米子表象出发导出第 4.1 节中的电子分数化表象. 由此, 我们可以证明, 尽管波函数中没有显式出现奇异相因子 $e^{i\hat{\Omega}_i}$, 相位弦效应仍然会影响每个子体系的动力学, 以演生规范势的形式出现在子体系有效哈密顿量中.

在辅助费米子表象中, 相位弦效应可以追溯到 Hubbard 模型 (11) 中 E_{ij}^\dagger 项前面的负号. 类似 t - J 模型中的做法 [8], 进行如下的么正变换:

$$\hat{O} \mapsto e^{i\hat{\Theta}} \hat{O} e^{-i\hat{\Theta}}, \quad \hat{\Theta} \equiv \sum_{i,l}^{i \neq l} (n_i^h - n_i^d) \theta_i(l) n_{i,l}^b. \quad (43)$$

变换后的哈密顿量为

$$\begin{aligned} e^{i\hat{\Theta}} H_t e^{-i\hat{\Theta}} &= H_t^0 + H_t^1, \\ e^{i\hat{\Theta}} H_U e^{-i\hat{\Theta}} &= U \sum_i d_i^\dagger d_i. \end{aligned} \quad (44)$$

H_t^0 项的定义是

$$H_t^0 = -t \sum_{\langle ij \rangle} \left(\hat{\Delta}_{ij}^s \right)^\dagger \hat{\Delta}_{ij}^c + \text{H.c.} \quad (45)$$

它包含了 b -自旋子与电荷子对的产生与消灭过程. 其中,

$$\hat{\Delta}_{ij}^s \equiv \sum_{\sigma} e^{-i\sigma A_{ij}^c} b_{i\sigma} b_{j-\sigma}, \quad (46)$$

$$\hat{\Delta}_{ij}^c \equiv e^{-i(A_{ij}^s - \phi_{ij}^0)} h_i d_j + e^{i(A_{ij}^s - \phi_{ij}^0)} h_j d_i. \quad (47)$$

三个键变量 A_{ij}^c , A_{ij}^s 与 ϕ_{ij}^0 分别定义为

$$A_{ij}^c = \frac{1}{2} \sum_{l \neq i,j} (\theta_i(l) - \theta_j(l)) (n_l^h - n_l^d), \quad (48)$$

$$A_{ij}^s = \frac{1}{2} \sum_{l \neq i,j} (\theta_i(l) - \theta_j(l)) (n_{l\uparrow}^b - n_{l\downarrow}^b), \quad (49)$$

$$\phi_{ij}^0 = \frac{1}{2} \sum_{l \neq ij} (\theta_i(l) - \theta_j(l)). \quad (50)$$

(45) 与 (66) 式中的电荷子算符已经利用 Jordan-Wigner 变换玻色化:

$$\begin{aligned} h_i e^{-i \sum_{l \neq i} \theta_l(i) n_l^h} &\mapsto h_i, \\ e^{i \sum_{l \neq i} \theta_l(i) n_l^h} h_i^\dagger &\mapsto h_i^\dagger; \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} d_i e^{i \sum_{l \neq i} \theta_l(i) n_l^d} &\mapsto d_i, \\ e^{-i \sum_{l \neq i} \theta_l(i) n_l^d} d_i^\dagger &\mapsto d_i^\dagger. \end{aligned} \quad (52)$$

新定义的电荷子算符满足如下的对易关系 ($i \neq j$):

$$[h_i, h_j] = [h_i^\dagger, h_j^\dagger] = [h_i, h_j^\dagger] = 0, \quad (53)$$

$$[d_i, d_j] = [d_i^\dagger, d_j^\dagger] = [d_i, d_j^\dagger] = 0, \quad (54)$$

$$\begin{aligned} \{h_i, d_j\} &= \{h_i, d_j^\dagger\} = \{h_i^\dagger, d_j\} \\ &= \{h_i^\dagger, d_j^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (55)$$

H_t^1 项包含电荷子的跃迁过程:

$$\begin{aligned} H_t^1 &= -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} e^{i\sigma A_{ij}^c} \\ &\times \left(h_j^\dagger h_i e^{i(A_{ji}^s - \phi_{ji}^0)} + d_j^\dagger d_i e^{-i(A_{ji}^s - \phi_{ji}^0)} \right) \\ &+ \text{H.c.} \end{aligned} \quad (56)$$

在大 U/t 区域, 积掉 H_t^0 项中的电荷涨落过程可以得到 b -自旋子的反铁磁交换作用, 描写体系的反铁磁关联; H_t^1 项描写电荷子的跃迁过程, 它倾向于形成巡游电子态. 大 U/t 极限下, H_t^0 表示的反铁磁交换作用与 H_t^1 表示的电荷巡游性之间的竞争是研究 t - J 模型的主要困难. 当 U/t 减小时, 即使在半满情况下, 由于电荷涨落, 二者的竞争也愈加重要. 因此, 类似在 t - J 模型中采用的方法 [9], 在扩大的态空间中引入 a -自旋子算符:

$$a_{i\sigma}^\dagger e^{-i\sigma \sum_{l \neq i} \theta_l(i) n_l^a} \leftrightarrow b_{i-\sigma} (n_i^h + n_i^d). \quad (57)$$

同时, 电荷子算符被映射为

$$h_i \mapsto h_i e^{-i \sum_{l \neq i} \theta_l(i) n_l^d \sum_{\sigma} \sigma n_{i\sigma}^a}, \quad (58)$$

$$d_i \mapsto d_i e^{i \sum_{l \neq i} \theta_l(i) n_l^h \sum_{\sigma} \sigma n_{i\sigma}^a}. \quad (59)$$

这样一来, (55) 式中的反对易关系变成了对易关系, 电荷子算符被完全玻色化了. 另一方面, a -自旋子

的产生算符 $a_{i\sigma}^\dagger$ 是费米算符, 其作用等价于在电荷子格点上消灭一个自旋为 $-\sigma$ 的 b -自旋子. 在扩大的态空间中, 每个格点上都有一个 b -自旋子, 在原来的态空间中消灭一个 b -自旋子等价于在新的态空间中同一格点上产生一个自旋相反的 a -自旋子, 使得总自旋

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_i^b + \mathbf{S}_i^a = 0. \quad (60)$$

其中, a -自旋子携带的自旋 $\mathbf{S}_i^a = -n_i^c \mathbf{S}_i^b$. b -自旋算符为

$$S_b^z = \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} \sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}, \quad (61)$$

$$\begin{aligned} S_b^+ &= \sum_i (-1)^i b_{i\uparrow}^\dagger b_{i\downarrow} e^{i \sum_{l \neq i} \theta_i(l)(n_l^h - n_l^d)} \\ &= (S_b^-)^\dagger. \end{aligned} \quad (62)$$

a -自旋算符为

$$S_a^z = \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} \sigma a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}, \quad (63)$$

$$S_a^+ = \sum_i (-1)^i a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow} = (S_a^-)^\dagger. \quad (64)$$

投影电子算符 $\hat{c}_{i\sigma}$ 作用在背景 $|b\text{-RVB}\rangle$ 上可以产生或消灭电荷子与 a -自旋子, 它是 (37) 与 (38) 式的组合:

$$\hat{c}_{i\sigma} = \hat{P}(h_i^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger + \sigma d_i a_{i\sigma}) e^{i\hat{\Omega}_i} (-\sigma)^i. \quad (65)$$

在粒子数约束 (42) 下, 跃迁项 H_t^1 可以用 a -自旋子与电荷子的跃迁项表达:

$$\begin{aligned} H_t^1 &= -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} \left(h_i^\dagger h_j e^{i(A_{ij}^s - \phi_{ij}^0)} \right. \\ &\quad \left. + d_i^\dagger d_j e^{-i(A_{ij}^s - \phi_{ij}^0)} \right) + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (66)$$

其中, b -自旋子的跃迁已经用 a -自旋子的回流过程代替. (45) 与 (66) 式中的 $H_t^{0,1}$ 两项以及 (12) 式中的 H_U 项构成了扩大的态空间中 Hubbard 模型的严格表示, 可以用来研究波函数拟设 (39) 在半满或任意掺杂浓度下任意耦合强度 U/t 下的性质. Hubbard 模型内禀的符号结构在这个表象下以 (48)–(50) 式中定义的键变量出现在哈密顿量中.

4.3 演生规范场的直观理解

我们为 Hubbard 模型的符号结构与电子分数化表象中的演生规范场 $A_{ij}^{s;c}$ 与 ϕ_{ij}^0 的关系提供一个直观的理解. 符号结构中的 $(-1)^{S_{a(h)_i}^{[c]}}$ 代表电荷子与下自旋交换的次数. 它可以看作绑定在

下自旋格点上由电荷子感受到的 -2π 磁通产生的 Aharonov-Bohm (AB) 相位. 这一磁通绑定效应体现为在 b -RVB 态上产生电荷子造成的整体相移 $e^{i\hat{\Omega}_i}$. 令每个格点占据一个 b -自旋子, 上述绑定的磁通可以分为两部分: 每个格点上绑定的 $-\pi$ 的静磁通与每个自旋为 σ 的格点上绑定的 $\sigma\pi$ 磁通, 相应的规范势分别记作 ϕ_{ij}^0 与 A_{ij}^s . 在任意空间回路 C 包围的面积 Ω 上, ϕ_{ij}^0 与 A_{ij}^s 满足如下的拓扑约束:

$$\sum_{\langle ij \rangle \in C} \phi_{ij}^0 = \pi \sum_{l \in \Omega} 1 \pmod{2\pi}. \quad (67)$$

$$\sum_{\langle ij \rangle \in C} A_{ij}^s = \pi \sum_{l \in \Omega} (n_{l\uparrow}^b - n_{l\downarrow}^b) \pmod{2\pi}. \quad (68)$$

双占据态与空穴子分别携带规范场 A_{ij}^s 的 $+1$ 与 -1 的规范荷. 另一方面, 利用电荷与磁通的对偶关系, 电荷子也绑定 $\pm\pi$ 的磁通, 被 b -自旋子感受到, 这一磁通的规范势 A_{ij}^c 满足

$$\sum_{\langle ij \rangle \in C} A_{ij}^c = \pi \sum_{l \in \Omega} (n_l^h - n_l^d) \pmod{2\pi}. \quad (69)$$

(67) 与 (69) 式表明, b -自旋子与电荷子具有交互半子统计 [8], 这种统计相互作用可以用交互 Chern-Simons 规范理论来刻画 [23–25].

(65) 式中的 (投影) 电子算符的形式也可以直观地理解. 电子算符在 b -自旋子的 RVB 背景上作用会产生或湮没一个格点上的电荷子与 a -自旋子. 由于电荷子上绑定 $\pm\pi$ 磁通, 插入电荷子会使背景的 b -自旋子的角动量增减 $1/2$, 这与分数量子 Hall 效应中插入磁通产生准空穴的效应类似 [26]. 因此, 电子算符的形式是电荷子算符, a -自旋子算符与相移因子 $e^{i\hat{\Omega}_i}$ 的乘积. 相移因子 $e^{i\hat{\Omega}_i}$ (36) 将每个自旋 σ 的 b -自旋子的角动量改变 $\sigma/2$, 从而改变了多体波函数的相对相位. 另外, 它也保证了电子算符 $\hat{c}_{i\sigma}$ 在如下规范变换下不变: $h_i \mapsto h_i e^{-i\theta_i}$, $d_i \mapsto d_i e^{i\theta_i}$, $A_{ij}^s \mapsto A_{ij}^s - \theta_i + \theta_j$, $\hat{\Omega}_i \mapsto \hat{\Omega}_i - \theta_i$. 因此, $\hat{c}_{i\sigma}$ 不携带演生规范场 A_{ij}^s 规范荷.

电子算符 (9) 在如下的规范变换下也保持不变: $h_i \mapsto h_i e^{i\theta_i}$, $d_i \mapsto d_i e^{i\theta_i}$, $a_{i\sigma} \mapsto a_{i\sigma} e^{-i\theta_i}$. 这一规范不变性来源于每个格点上的粒子数约束: $\sum_{\alpha} n_{i\alpha}^h = \sum_{\sigma} n_{i\sigma}^a$. 这表明, 低能下, 电荷子与 a -自旋子会耦合到另一个演生的 $U(1)$ 规范场. 然而, H_t^0 中电荷子成对产生的过程破坏了连续的 $U(1)$ 规范不变性, 代之以 \mathbb{Z}_2 的规范不变性, 规范涨落打开能隙. 因此, 我们期待平均场态在粒子数约束的规范涨落下是稳定的.

4.4 交互 Chern-Simons 规范理论

在 H_t^0 中, 引入 b -自旋子的短程 RVB 序参量 $\Delta_s = \langle \hat{\Delta}_{ij}^s \rangle$ 与电荷子的配对序参量 $\Delta_c = \langle \hat{\Delta}_{ij}^c \rangle$, 得到 b -自旋子的平均场哈密顿量:

$$H_b = -J_s \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} e^{i\sigma A_{ij}^s} b_{i\sigma}^\dagger b_{j-\sigma}^\dagger + \text{H.c.} - \mu_b \sum_{i, \sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}. \quad (70)$$

其中, $J_s \equiv t\Delta_c$, μ_b 是 b -自旋子的化学势. b -自旋子的有效哈密顿(70)在 A_{ij}^c 的规范变换下保持不变: $b_{i\sigma}^\dagger \mapsto b_{i\sigma}^\dagger e^{i\sigma\theta_i}$, $A_{ij}^c \mapsto A_{ij}^c - \theta_i + \theta_j$.

在 H_t^1 中, 引入平均场参数 $\chi_c = \langle \hat{\chi}_{ij}^c \rangle$ 与 $\chi_a = \langle \hat{\chi}_{ij}^a \rangle$, 它们分别描写电荷子与 a -自旋子的跃迁过程, 得到 H_t^1 的平均场分解. 考虑到 H_t^0 分解得到的电荷子配对项以及 $H_U = \frac{1}{2}U \sum_i (h_i^\dagger h_i + d_i^\dagger d_i)$, 电荷子与 a -自旋子的有效哈密顿量为

$$\begin{aligned} H_c = & -t_c \sum_{\langle ij \rangle} (e^{i(A_{ij}^s - \phi_{ij}^0)} h_i^\dagger h_j \\ & + e^{-i(A_{ij}^s - \phi_{ij}^0)} d_i^\dagger d_j) + \text{H.c.} \\ & - J_c \sum_{\langle ij \rangle} (e^{i(A_{ij}^s - \phi_{ij}^0)} h_i^\dagger d_j^\dagger \\ & + e^{i(A_{ji}^s - \phi_{ji}^0)} h_j^\dagger d_i^\dagger) + \text{H.c.} \\ & + (U/2 - \mu_c) \sum_i (h_i^\dagger h_i + d_i^\dagger d_i), \quad (71) \end{aligned}$$

$$H_a = -t_a \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} - \mu_a \sum_{i, \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}. \quad (72)$$

其中, $t_{c,a} \equiv t\chi_{a,c}$, $J_c \equiv t\Delta_s$, $\mu_{c,a}$ 为电荷子与 a -自旋子的化学势.

b -自旋子的低能有效理论可以从有效哈密顿量(70)导出. 利用玻色子的相干态路径积分, 得到 b -自旋子的格点拉氏量 (Lagrangian):

$$\begin{aligned} L_b = & \sum_{i, \sigma} b_{i\sigma}^\dagger \partial_\tau b_{i\sigma} - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \Delta_{ij}^c e^{i\sigma A_{ij}^c} b_{i\sigma}^\dagger b_{j-\sigma}^\dagger + \text{H.c.} \\ & - \sum_i \mu_b(i) \left(\sum_\sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} - 1 \right) \\ & - i \sum_i A_0^c(i) \left(\sum_\sigma \sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} - \frac{1}{\pi} \epsilon_{\alpha\beta} \Delta_\alpha A_\beta^s(i) \right). \quad (73) \end{aligned}$$

其中, $\epsilon_{\alpha\beta} \Delta_\alpha A_\beta^s(i)$ 是 A_{ij}^s 在 i 格点周围的 (离散形式的) 旋度. 拉氏乘子 $\mu_b(i)$ 与 $A_0^c(i)$ 分别保证 b -自旋子的单占据约束以及 (68) 式中关于 A_{ij}^s 的拓扑约束, 后者包含在后文中讨论的 A_{ij}^c 与 A_{ij}^s 的交互 Chern-Simons 拓扑项中 [23-25]. 只考虑 $\mu_b(i)$ 与

Δ_{ij}^c 中的低能相位涨落, $\mu_b(i) = \mu_b + i(-1)^i \mathcal{A}_0(i)$, $\Delta_{ij}^c = \Delta_c e^{iA_{ij}^c}$ ($i \in A, j \in B$), 得到

$$\begin{aligned} L_b = & \sum_{i, \sigma} b_{i\sigma}^\dagger (\partial_\tau - i(-1)^i \mathcal{A}_0(i) - i\sigma A_0^c(i) - \mu_b) b_{i\sigma} \\ & - J_s \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} b_{i\sigma}^\dagger e^{i(A_{ij}^c + \sigma A_{ij}^c)} b_{j-\sigma}^\dagger + \text{H.c.} \quad (74) \end{aligned}$$

其中, $J_s \equiv t\Delta_c$. 由于 μ_b 是玻色场的化学势, 一般有 $\mu_b \leq 0$.

有效拉氏量(74)具有如下的规范不变性:

$$\begin{aligned} b_{i\sigma}^\dagger & \mapsto b_{i\sigma}^\dagger e^{i\theta_i}, \\ b_{j\sigma}^\dagger & \mapsto b_{j\sigma}^\dagger e^{-i\theta_j}, \\ A_{ij} & \mapsto A_{ij} - \theta_i + \theta_j, \\ A_0(i) & \mapsto A_0(i) - \partial_\tau \theta_i. \quad (75) \end{aligned}$$

其中, $i \in A, j \in B$. 这表明 A_{ij} 是演生的 U(1) 规范场, 与 b -自旋子场耦合. 由于如下类似的规范不变性:

$$\begin{aligned} b_{i\sigma}^\dagger & \mapsto b_{i\sigma}^\dagger e^{i\sigma\theta_i}, \\ A_{ij}^c & \mapsto A_{ij}^c - \theta_i + \theta_j, \\ A_0^c(i) & \mapsto A_0^c(i) - \partial_\tau \theta_i. \quad (76) \end{aligned}$$

A_{ij}^c 也是演生的 U(1) 规范场, 并与 b -自旋子场耦合.

我们接下来导出 b -自旋子的连续场论拉氏量. 在 A, B 两套子格上分别定义连续场 $\chi_{A/B, \sigma}(r)$, $b_{i\sigma} = \chi_{A\sigma}(r)$ ($i \in A$), $b_{i\sigma} = \chi_{B-\sigma}^*(r)$ ($i \in B$), 再将其分解为两个分量: $\chi_{A/B, \sigma}(r) = z_\sigma(r) \pm Z_\sigma(r)$. 在连续性极限下,

$$\begin{aligned} L_b \simeq & \sum_\sigma \int \frac{d^2r}{V} \left[(z_\sigma^* + Z_\sigma^*) (\partial_\tau - iA_0 - i\sigma A_0^c - \mu_b) \right. \\ & (z_\sigma + Z_\sigma) + (z_\sigma - Z_\sigma) (\partial_\tau + iA_0 + i\sigma A_0^c - \mu_b) \\ & (z_\sigma^* - Z_\sigma^*) - J_s (z_\sigma^* + Z_\sigma^*) \sum_{\mathbf{a}_s} \left(1 - i\mathbf{a}_s \cdot \mathbf{A} \right. \\ & \left. - i\sigma \mathbf{a}_s \cdot \mathbf{A}^c - \frac{1}{2} (\vec{a}_s \cdot \mathbf{A} + \sigma \vec{a}_s \cdot \vec{A}^c)^2 \right) \\ & \left. \times \left(1 + \mathbf{a}_s \cdot \boldsymbol{\partial} + \frac{1}{2} (\mathbf{a}_s \cdot \boldsymbol{\partial})^2 \right) (z_\sigma - Z_\sigma) + \text{H.c.} \right] \\ = & 2 \sum_\sigma \int \frac{d^2r}{V} \left[z_\sigma^* (\partial_\tau - iA_0 - i\sigma A_0^c) Z_\sigma + Z_\sigma^* (\partial_\tau \right. \\ & \left. - iA_0 - i\sigma A_0^c) z_\sigma - \mu_b (z_\sigma^* z_\sigma + Z_\sigma^* Z_\sigma) \right. \\ & \left. - J_s z_\sigma^* (g + \tilde{V} (\boldsymbol{\partial} - i\mathbf{A} - i\sigma \mathbf{A}^c)^2) z_\sigma \right. \\ & \left. + J_s Z_\sigma^* (g + \tilde{V} (\boldsymbol{\partial} - i\mathbf{A} - i\sigma \mathbf{A}^c)^2) Z_\sigma \right]. \quad (77) \end{aligned}$$

其中, V 为包含两个格点 (扩大的原胞) 的面积, \mathbf{a}_s 为 i 格点到其最近邻格点的向量. g 是格子的配

位数, 即每个格点有几个最近邻格点, \tilde{V} 定义为 $(\vec{a}_s \cdot \vec{\delta})^2/2 = \tilde{V}\nabla^2$. Z_σ 总是有能隙, 可以积掉, 得到

$$L_b = 2 \sum_{\sigma} \int \frac{d^2r}{V} \left[\frac{1}{-\mu_b + gJ_s} |(\partial_\tau - iA_0 - i\sigma A_0^c)z_\sigma|^2 + J_s \tilde{V} |(\partial - iA - i\sigma A_0^c)z_\sigma|^2 + (-\mu_b - gJ_s) |z_\sigma|^2 \right]. \quad (78)$$

对时空长度取合适的重新标度, b -自旋子的低能拉氏量为

$$L_b \propto \sum_{\sigma} |(\partial_\mu - iA_\mu - i\sigma A_\mu^c)z_\sigma|^2 + m_b^2 \sum_{\sigma} |z_\sigma|^2. \quad (79)$$

其中, $\mu = x, y, t$. 质量平方 m_b^2 的正负决定了 b -自旋子在基态是否凝聚. 用文献 [23] 中的方法, 可以证明有效拉氏量 (79) 在 SU(2) 自旋旋转下的不变性.

用类似的方法可以导出电荷子的低能有效拉氏量. 引入连续场 $h = \phi_+$ 与 $d = \phi_-^*$, 以及 $\phi_{\pm} = \phi \pm \Phi$, 积掉有能隙的 Φ 分量, 可以得到电荷子的低能拉氏量:

$$L_c \propto |(\partial_\mu - iA_\mu^s)\phi|^2 + m_c^2 |\phi|^2. \quad (80)$$

质量平方项 m_c^2 的符号决定了电荷子在基态是否凝聚.

a -自旋子的有效哈密顿量 (72) 表明, a -自旋子通常会形成费米面. 它的有效拉氏量为

$$L_a \propto \sum_{\sigma} a_{\sigma}^{\dagger} \partial_{\tau} a_{\sigma} + \frac{1}{2m_a} |\partial_i a_{\sigma}|^2 - \mu_a a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma}. \quad (81)$$

我们将在第 5.3 节中讨论 a -自旋子形成配对的可能性及其影响.

b -自旋子与电荷子之间的交互磁通绑定效体现在交互 Chern-Simons 项中 [23-25]

$$L_{MCS} = \frac{i}{\pi} \epsilon_{\mu\nu\lambda} A_{\mu}^c \partial_{\nu} A_{\lambda}^s. \quad (82)$$

其中, $\epsilon_{\mu\nu\lambda}$ 是三阶全反对称张量. 在拉氏量 (79) 与 (82) 中, 对 A_{μ}^c 取泛函微分, 得到 $\epsilon_{\mu\nu\lambda} \partial_{\nu} A_{\lambda}^s = \pi \sum_{\sigma} \sigma J_{\sigma\mu}^s$. 其中, $J_{\sigma\mu}^s$ 是 b -自旋子的流密度. 这表明 b -自旋子总是与 A_{μ}^s 的 $\pm\pi$ 磁通一起运动, 代表磁通绑定效应. 用类似的方法, 对 A_{μ}^s 取泛函微分, 可以证明电荷子绑定 $\pm\pi$ 的 A_{μ}^c 磁通. 交互 Chern-Simons 项也用于研究其他的强关联电子体系, 如 \mathbb{Z}_2 规范理论 [27], \mathbb{Z}_2 自旋液体 [28] 以及拓扑自旋 Hall 态 [29,30] 等.

5 半满 Hubbard 模型的整体相图

第 3.2 与 4 节中引入的 Hubbard 模型的基态波函数拟设与电子分数化表象可以正确描述弱耦合区域的巡游电子态以及强耦合区域的长程反铁磁态. 本节中, 我们将用有效场论来刻画 Hubbard 模型的整体相图以及每个相的低能激发.

5.1 巡游电子态

根据分数化表象下的电子算符形式 (65), 电子的格林函数中包含相移因子的关联: $G(i, j; t) \equiv \langle \hat{c}_{i\sigma}(t) \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \propto \langle e^{i\hat{\Omega}_i(t)} e^{-i\hat{\Omega}_j(0)} \rangle$. 相移因子的关联函数的长程渐近行为取决于 b -自旋子的长程关联, $n_s(r) = (-1)^r \langle (n_{r\uparrow}^b - n_{r\downarrow}^b) \dots (n_{0\uparrow}^b - n_{0\downarrow}^b) \rangle$. 对于相移因子的等时关联, 我们解析得到如下结果 [31]:

$$-\ln \langle e^{i\hat{\Omega}_i} e^{-i\hat{\Omega}_j} \rangle \propto \begin{cases} |i-j|^{2-\alpha}, & n_s(r) \sim r^{-\alpha}, \alpha < 2; \\ \ln |i-j|, & \alpha = 2; \\ \text{常数}, & \alpha > 2 \\ \text{or } n_s(r) \sim e^{-r/\xi}. \end{cases} \quad (83)$$

因此, 如果 b -自旋子形成玻色凝聚, $\alpha \simeq 1$, 则电子的关联函数指数衰减, 这是由于无能隙的自旋子激发引起了 $e^{i\hat{\Omega}_i}$ 中强烈的相位涨落, 导致电子的长程传播因不同路径的相消干涉受到抑制. 反之, 如果 b -自旋子有能隙, 它的关联函数指数衰减, $n_s(r) \sim e^{-r/\xi}$, 那么相移因子就有长程的相位关联: $Z_{\Omega} \equiv \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle e^{i\hat{\Omega}_i} e^{-i\hat{\Omega}_j} \rangle > 0$. 这反映了 Hubbard 模型中电荷与自旋自由度的对偶性质.

在弱耦合极限下, 空穴子—双占据态没有能隙. 因此, 电荷子玻色凝聚, 电荷子的传播子在长程下正比于超流密度: $\langle h_{i\alpha}^{\dagger} h_{j\alpha} \rangle \simeq Z_h, |i-j| \rightarrow \infty$. 另一方面, b -自旋子的长程 RVB 配对被打断, b -自旋子产生能隙, 由于电荷子激发导致的 A_{μ}^c 磁通的涨落而被禁闭. 因此, 根据 (83) 式, $Z_{\Omega} > 0$.

在单电子格林函数的 RPA 近似下, 哈密顿量中的 H_t^1 项可以使电荷子与 a -自旋子形成束缚态, 成为巡游电子态中的准粒子. 首先, 根据 (65) 式, 电子传播子为

$$\begin{aligned}
 G(i, j; t) &= \langle \hat{c}_{i\sigma}(t) \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle \propto \langle (h_i^\dagger a_{i-\sigma}^\dagger e^{i\hat{\Omega}_i}(t) \\
 &\quad \times e^{-i\hat{\Omega}_j} a_{j-\sigma} h_j(0)) \\
 &\quad + \langle d_i a_{i\sigma} e^{i\hat{\Omega}_i}(t) e^{-i\hat{\Omega}_j} a_{j-\sigma}^\dagger d_j^\dagger(0) \rangle. \quad (84)
 \end{aligned}$$

将电荷子传播子与相移因子关联的长程渐近形式代入, 得到

$$\begin{aligned}
 G^0(i, j; t) &\simeq \langle e^{i\hat{\Omega}_i(j)}(t) e^{-i\hat{\Omega}_j(i)}(0) \rangle \left(\langle h_i^\dagger h_j \rangle \langle a_{i-\sigma}^\dagger(t) a_{j-\sigma}(0) \right. \\
 &\quad \times e^{-i[\theta_i(j)n_{j\downarrow}^b - \theta_j(i)n_{i\downarrow}^b]} + \langle d_i d_j^\dagger \rangle \langle a_{i\sigma}(t) a_{j\sigma}^\dagger(0) \\
 &\quad \left. e^{-i[\theta_i(j)n_{j\downarrow}^b - \theta_j(i)n_{i\downarrow}^b]} \right) \\
 &\simeq Z_h Z_\Omega (\langle a_{i-\sigma}^\dagger(t) a_{j-\sigma}(0) \rangle - \langle a_{i\sigma}(t) a_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle), \quad (85)
 \end{aligned}$$

其中, $\hat{\Omega}_i(j) \equiv \sum_{l \neq i, j} \theta_i(l) (\sum_\sigma \sigma n_{l\sigma}^b - 1)$. 因此, 电子传播子的首阶为

$$G_k^0(\omega) \simeq \frac{Z_h Z_\Omega}{\omega - \xi_k^a}. \quad (86)$$

在方格子上, $\xi_k^a \equiv -2t_a(\cos k_x + \cos k_y) - \mu_a$ 是 a -自旋子的能谱. 下面考虑跃迁项 H_t^1 的影响. 如图 4 所示, H_t^1 对电子传播子的 RPA 修正为

$$\begin{aligned}
 G_k^{\text{coh.}}(\omega) &\simeq \frac{G_k^0(\omega)}{1 - G_k^0(\omega)\epsilon_k} \\
 &= \frac{Z}{\omega - \xi_k^a - Z_h Z_\Omega \epsilon_k}, \quad (87)
 \end{aligned}$$

其中, $\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ 是 H_t^1 项引入的相互作用顶角. $Z \equiv Z_h Z_\Omega$ 是准粒子权重. 这表明, 可以有两种不同的方式破坏准粒子的相干性: 电荷子产生能隙, 从而 $Z_h \rightarrow 0$, 或者 b -自旋子凝聚, 从而相移因子的关联 $Z_\Omega \rightarrow 0$. 这两种机理都使巡游电子态发生 Mott 转变, 成为 Mott 绝缘体. 在巡游电子相中, b -自旋子的禁闭表明体系没有拓扑序, 满足 Luttinger 定理 [32]. 因此, 在弱耦合极限下, 体系成为通常的费米液体态.

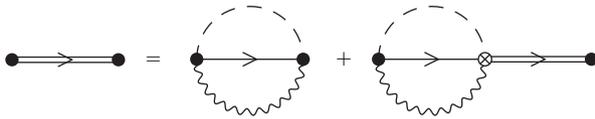


图 4 H_t^1 对电子传播子的 RPA 修正. 单线, 双线, 虚线以及波浪线分别代表 a -自旋子, 电子与电荷子的传播子以及相移因子的关联函数

Fig. 4. RPA correction to the electron propagator introduced by H_t^1 term. The solid lines, double lines and wavy lines represent the a -spinon propagators, the electron propagators and the correlation function of the phase factor, respectively.

5.2 长程反铁磁序

在强耦合区域, U 项升高了电荷子的化学势, 电荷子产生能隙. 当 b -自旋子凝聚时, 低能拉氏量 (79) 中的 z_σ 场获得非零的真空期望值, \bar{z}_σ 可以参数化: $z \equiv (\bar{z}_\uparrow, \bar{z}_\downarrow) = \bar{z} e^{i\Theta} (\cos(\alpha/2) e^{i\theta/2}, \sin(\alpha/2) e^{-i\theta/2})$. z_σ 场与反铁磁序参量 $\vec{n} = \vec{S}_A - \vec{S}_B$ 的关系为: $\vec{n} \simeq z^\dagger(r) \vec{\sigma}_z(r)$. 模值 \bar{z} 的涨落有能隙, 而相角 α, Θ 与 θ 的涨落没有能隙, 是玻色凝聚体中潜在的 (would-be) Goldstone 模式. 由于 z_σ 场与规范场耦合, 通过 Higgs 机制, Θ 与 θ 模式分别被两个规范场 A_μ 和 A_μ^c 吸收为有能隙的纵向分量, 只有 α 模式成为真正的无能隙的 Goldstone 模式. 由于电荷子有能隙, 在交互 Chern-Simons 项中积掉 A_μ^c 场, 得到 A_μ^s 的 Maxwell 项. b -自旋子与 A_μ^s 之间的磁通绑定效应导致 $\epsilon_{\mu\nu\lambda} \partial_\nu A_\lambda^s \sim \partial_\mu \theta$. 换句话说, A_μ^s 的 Maxwell 形式的涨落等价于 θ 模式的无能隙涨落. 因此, 强耦合区域中有两支无能隙的 Goldstone 模式, α 与 A_μ^s , 与长程反铁磁序的低能激发一致.

5.3 弱 Mott 绝缘区域

我们接下来考虑中等耦合区域, 尤其是 Mott 转变点附近可能的量子相图. 第一种可能性是直接由巡游电子态到长程反铁磁序的量子相变, 如图 5 (a) 所示. 当 U/t 增加到量子临界点时, 电荷子打开能隙, b -自旋子的能隙关闭. 由于二者的交互统计, 这两个过程可以在解禁闭的量子临界点同时发生 [33,34], 这可以是连续相变. Herbut 等指出六角晶格上的 Hubbard 模型的半金属-反铁磁转变由 Gross-Neveu 模型描写 [35-37], 其中, 长程的反铁磁涨落与 Dirac 电子的耦合导致电子打开能隙并形成反铁磁序. 在我们提出的交互 Chern-Simons 理论与解禁闭的临界点图像中, 反铁磁相的局域自旋磁矩由电子分数化得到的 b -自旋子描写, 这与上述弱耦合图像有很大区别 [38-40].

另一种可能性是解禁闭的临界点扩展为一个有限的区域, 形成一个稳定的量子相. 在这个相中, b -自旋子与电荷子都解禁闭并形成玻色凝聚, 如图 5 (b) 所示. b 自旋算符 (64) 中的相位因子 $e^{i\Phi_i^c} \equiv e^{i \sum_{l \neq i} \theta_i(l) (n_l^d - n_l^h)}$ 的关联函数的渐近形式与 (83) 式中的结果相似, 只是电荷子与自旋子的位置对调. 因此, 电荷子的凝聚体破坏了自旋的长程相位相干性, 体系没有长程反铁磁序. 从有效场论

来看, 电荷子的凝聚体通过 Higgs 机理使 A_μ^s 产生能隙, 因此, 体系中只留下一支无能隙的自旋激发模式 α , 它代表局域的自旋涨落.

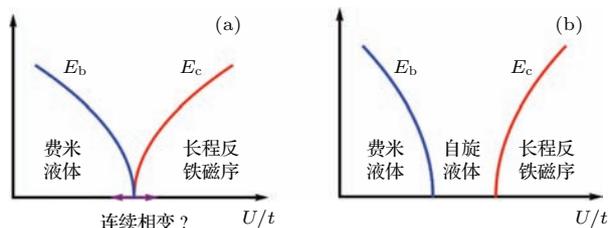


图5 由交互 Chern-Simons 理论得到的整体量子相图. E_b 与 E_c 分别表示 b -自旋子与电荷子的能隙. (a) 巡游电子态与长程反铁磁序之间可以通过解禁闭的量子临界点发生连续相变; (b) 量子临界点扩展为有限的区域, 在这个相中, 两种粒子都发生玻色凝聚, 体系具有无能隙的自旋涨落

Fig. 5. The global quantum phase diagram from the mutual Chern-Simons theory. E_b and E_c stand for the energy gaps of b -spinons and chargons, respectively. (a) A continuous phase transition between the itinerant electron state and the long range antiferromagnetic order via a deconfined quantum critical point; (b) The critical point extends to a finite region, in which both particle species are Bose condensed and there are gapless spin fluctuations.

除了电荷子与 b -自旋子的低能激发外, a -自旋子的费米面会贡献有限的低能态密度, 影响低能的磁化率 χ , 比热 C_V 与热导率 κ 等热力学性质. 在低温下, χ , C_V/T , κ/T 趋于常数. 因此, 这个自旋液体态可以定性地解释有机材料 κ - $\text{Et}_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$ 与 $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ 中的反常实验现象^[41-45].

由于 a -自旋子与 b -自旋子的耦合, b -自旋子的 RVB 配对也可能造成 a -自旋子的配对. 如果 a -自旋子配对导致它的费米面打开能隙, 则上述自旋液体态在低温下会发生相变, 成为有能隙的 \mathbb{Z}_2 自旋液体, 其中, \mathbb{Z}_2 是指第 4.3 节中提到的 \mathbb{Z}_2 的规范涨落. 这个相变可能与 κ - $\text{Et}_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$ 材料中 5K 左右打开能隙的现象有关^[45-49].

6 结论与讨论

本文首先回顾了文献 [12] 中给出的 Hubbard 模型的相位弦理论. 这一理论的出发点是 Hubbard 模型的严格的符号结构. 在 Mott 绝缘体中, 电子间的局域排斥作用完全抑制电荷涨落后, 电子置换带来的费米子符号问题被完全消除. 然而, 相互作用减弱时, 电荷运动会引起配分函数与关联函数中的

量子相位干涉. 这体现了自旋与电荷自由度之间的量子阻挫, 其精确涵义可以用哈密顿量的符号结构来表述. 利用严格的么正变换, 我们将其表达为自旋子与电荷子之间的交互统计, 即二者各自绑定演生的规范磁通, 被另一种粒子感受到. 我们据此构造了一种恰当的电子分数化表象及相应的基态波函数拟设, 可以刻画 Hubbard 模型的整体相图, 包括强耦合情形的长程反铁磁序相, 弱耦合情形的费米液体相以及 Mott 转变附近可能存在的自旋液体相.

从理论角度看, Mott 绝缘体中的相位弦效应与电子分数化表象体现了关联电子体系在相互作用下的演生 (emergence) 现象. 在较强的局域 Coulomb 相互作用下, 费米液体理论中微扰的电子准粒子不再能描述电子体系的低能激发, 而电子分数化的表象成为合适的理论出发点. 电子的费米统计在低能有效理论中让位于分数化的自旋子与电荷子之间的交互统计. 本文表明, Hubbard 模型在低能下的电子分数化与交互统计的性质完全取决于哈密顿量的符号结构. 因此, 我们也可以尝试将符号结构的观点推广到其他相互作用的电子模型中, 考察这些体系中是否有演生的粒子统计性质, 以此研究其基态与低能激发态的物理性质.

参考文献

- [1] Mott N F 1949 *Proc. Phys. Soc. A* **62** 416
- [2] Hubbard J 1963 *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* **276** 238
- [3] Roth W 1958 *Phys. Rev.* **110** 1333
- [4] Anderson P W 1987 *Science* **235** 1196
- [5] Lee P A, Nagaosa N, Wen X G 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 17
- [6] Wu K, Weng Z Y, Zaanen J 2008 *Phys. Rev. B* **77** 155102
- [7] Sheng D N, Chen Y C, Weng Z Y 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 5102
- [8] Weng Z Y, Sheng D N, Chen Y C, Ting C S 1997 *Phys. Rev. B* **55** 3894
- [9] Weng Z Y 2011 *New J. Phys.* **13** 103039
- [10] Arovas D P, Auerbach A 1988 *Phys. Rev. B* **38** 316
- [11] Auerbach A, Arovas D P 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 617
- [12] Zhang L, Weng Z Y 2014 *Phys. Rev. B* **90** 165120
- [13] Yoshioka D 1989 *J. Phys. Soc. Japan* **58** 32
- [14] Sarker S, Jayaprakash C, Krishnamurthy H R, Ma M 1989 *Phys. Rev. B* **40** 5028
- [15] Affleck I, Marston J B 1988 *Phys. Rev. B* **37** 3774
- [16] Marston J B, Affleck I 1989 *Phys. Rev. B* **39** 11538
- [17] Rantner W, Wen X G 2002 *Phys. Rev. B* **66** 144501
- [18] Marshall W 1955 *Proc. R. Soc. London A* **232** 48

- [19] Yoshioka D 1989 *J. Phys. Soc. Japan* **58** 1516
- [20] Weng Z Y, Muthukumar V N, Sheng D N, Ting C S 2001 *Phys. Rev. B* **63** 075102
- [21] Zhu Z, Jiang H C, Qi Y, Tian C, Weng Z Y 2013 *Sci. Rep.* **3** 2586
- [22] Liang S, Doucot B, Anderson P W 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 365
- [23] Kou S P, Qi X L, Weng Z Y 2005 *Phys. Rev. B* **71** 235102
- [24] Ye P, Tian C S, Qi X L, Weng Z Y 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 147002
- [25] Ye P, Tian C S, Qi X L, Weng Z Y 2012 *Nucl. Phys. B* **854** 815
- [26] Laughlin R B 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1395
- [27] Kou S P, Levin M, Wen X G 2008 *Phys. Rev. B* **78** 155134
- [28] Xu C, Sachdev S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 064405
- [29] Grover T, Senthil T 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 156804
- [30] Xu C, Sachdev S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 057201
- [31] Zhang L, Weng Z Y 2015 *unpublished*
- [32] Oshikawa M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 3370
- [33] Senthil T, Vishwanath A, Balents L, Sachdev S, Fisher M P A 2004 *Science* **303** 1490
- [34] Senthil T, Balents L, Sachdev S, Vishwanath A, Fisher M P A 2004 *Phys. Rev. B* **70** 144407
- [35] Herbut I F 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 146401
- [36] Herbut I F, Juričić V, Roy B 2009 *Phys. Rev. B* **79** 085116
- [37] Assaad F F, Herbut I F 2013 *Phys. Rev. X* **3** 031010
- [38] Anderson P W 1997 *The theory of superconductivity in the high-T_c cuprate superconductors* (NJ: Princeton University Press)
- [39] Moukouri S, Jarrell M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 167010
- [40] Schäfer T, Geles F, Rost D, Rohringer G, Arrigoni E, Held K, Blümer N, Aichhorn M, Toschi A 2014 *Phys. Rev. B* **91** 125109
- [41] Itou T, Oyamada A, Maegawa S, Tamura M, Kato R 2008 *Phys. Rev. B* **77** 104413
- [42] Yamashita M, Nakata N, Senshu Y, Nagata M, Yamamoto H M, Kato R, Shibauchi T, Matsuda Y 2010 *Science* **328** 1246
- [43] Yamashita S, Yamamoto T, Nakazawa Y, Tamura M, Kato R 2011 *Nat. Commun.* **2** 275
- [44] Watanabe D, Yamashita M, Tonegawa S, Oshima Y, Yamamoto H M, Kato R, Sheikin I, Behnia K, Terashima T, Uji S, Shibauchi T, Matsuda Y 2012 *Nat. Commun.* **3** 1090
- [45] Kanoda K, Kato R 2011 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **2** 167
- [46] Shimizu Y, Miyagawa K, Kanoda K, Maesato M, Saito G 2006 *Phys. Rev. B* **73** 140407
- [47] Yamashita S, Nakazawa Y, Oguni M, Oshima Y, Nojiri H, Shimizu Y, Miyagawa K, Kanoda K 2008 *Nat. Phys.* **4** 459
- [48] Yamashita M, Nakata N, Kasahara Y, Sasaki T, Yoneyama N, Kobayashi N, Fujimoto S, Shibauchi T, Matsuda Y 2009 *Nat. Phys.* **5** 44
- [49] Manna R S, de Souza M, Brühl A, Schlueter J A, Lang M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 016403

SPECIAL ISSUE—Progress in research of superconductivity and correlated systems

Phase string effect and mutual Chern-Simons theory of Hubbard model*

Zhang Long Weng Zheng-Yu[†]*(Institute for Advanced Study, Tsinghua University, Beijing 100084, China)*

(Received 26 May 2015; revised manuscript received 30 June 2015)

Abstract

The fermion sign plays a dominant role in Fermi liquid theory. However, in Mott insulators, the strong Coulomb interaction suppresses the charge fluctuations and eliminates the fermion signs due to electron permutation. In this article, we first review the phase string theory of the Hubbard model for a bipartite lattice, which unifies the Fermi liquid at weak coupling and the antiferromagnetic Mott insulator at strong coupling. We first derive the exact sign structure of the Hubbard model for an arbitrary Coulomb interaction U . In small U limit, the conventional fermion sign is restored, while at large U limit, it leads to the phase string sign structure of the t - J model. For half filling, we construct an electron fractionalization representation, in which chargons and spinons are coupled to each other via emergent mutual Chern-Simons gauge fields. The corresponding ground state ansatz and low energy effective theory capture the ground state phase diagram of the Hubbard model qualitatively. For weak coupling regime, the Fermi liquid quasiparticle is formed by the bound state of a chargin and a spinon, and the long range phase coherence is determined by the background spin correlation. The Mott transition can be realized either by forming the chargin gap or by condensing the background spinons.

Keywords: Hubbard model, Mott transition, phase diagram, sign structure**PACS:** 71.10.Fd, 71.10.Hf, 71.30.+h, 75.10.Kt**DOI:** 10.7498/aps.64.217101

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2010CB923003).

[†] Corresponding author. E-mail: weng@tsinghua.edu.cn