

激子的数值重整化群计算

Khunyang DU
2024 年 6 月 11 日

目录

1 引言	1
1.1 激子的概念	1
1.2 超导中的技术	1
2 MODEL	2
2.1 Hamiltonian	2
2.2 激子配对算符	2
3 DOWNFOLDING	3
3.1 实空间	3
3.2 k 空间	4
3.3 Differences	4
参考文献	4

1 引言

1.1 激子的概念

1.2 超导中的技术

singlet 超导配对关联算符（实空间）

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger - c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger) \quad (1)$$

注意到系统电荷的 $U(1)$ 对称性，有

$$\langle \Psi | c^\dagger c^\dagger | \Psi \rangle = 0 \quad (2)$$

这是因为在算符 $c^\dagger c^\dagger$ 的作用下， $c^\dagger c^\dagger | \Psi \rangle$ 的量子数发生变化，因此与 $| \Psi \rangle$ 正交，因此 $\langle \Delta_{ij} \rangle = 0$ 。

超导配对关联分布能通过 singlet 配对算符的二体密度矩阵求得 [2]

$$\rho_S(i, j; k, l) = \langle \Delta_{ij}^\dagger \Delta_{kl} \rangle \quad (3)$$

此矩阵本征值谱的主导阶意味着系统态 $| \Psi \rangle$ 中 ODLRO 序的存在 cite。其对应本征态为超导的可能的配对模式，包含全部的对称性的分类，即

$$\Delta^n = \sum_{i,j} g_{ij}^n \Delta_{ij} \quad (4)$$

不同的 n 对应系统可能的配对模式，有着不同的对称性。

与此对应的， \mathbf{k} 空间中的 singlet 配对算符的二体密度矩阵

$$\rho_S(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \mathbf{k}', \mathbf{k}') = \langle \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^\dagger \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \rangle \quad (5)$$

对角化后的本征值谱主导阶对应本征态

$$\Delta^n = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^n \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (6)$$

不同的 n 对应系统可能的配对模式，有着不同的对称性。其中 $f_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^n$ 称为形状因子，与 g_{ij}^n 唯一对应。

2 MODEL

2.1 Hamiltonian

Extended Hubbard Model

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma, \alpha} \left(c_{i\sigma\alpha}^\dagger c_{j\sigma\alpha} + \text{H.c.} \right) - t' \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle, \sigma, \alpha} \left(c_{i\sigma\alpha}^\dagger c_{j\sigma\alpha} + \text{H.c.} \right) \\ & + U \sum_{i, \alpha} n_{i\uparrow\alpha}^d n_{i\downarrow\alpha}^d + V \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma, \alpha} n_{i\sigma\alpha} n_{j\sigma\alpha} \end{aligned} \quad (7)$$

n -Extended Hubbard Model

$$H = -t_n \sum_{\langle i, j \rangle_n, \sigma, \alpha} \left(c_{i\sigma\alpha}^\dagger c_{j\sigma\alpha} + \text{H.c.} \right) + V_n \sum_{\langle i, j \rangle_n, \alpha} n_{i\sigma\alpha} n_{j\sigma\alpha} \quad (8)$$

2.2 激子配对算符

引入单电子近似，考虑系统对角化的哈密顿量

$$H = \sum_{\mathbf{k}, n, \sigma} E_n(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}n\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}n\sigma} \quad (9)$$

对应导带的产生算符

$$c_{\mathbf{k}c\sigma}^\dagger = \sum_{i, \alpha, \sigma} A_{c, i\alpha\sigma}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{i\alpha\sigma}^\dagger \quad (10)$$

约定：

- $c_{i\alpha\sigma}^\dagger$ 为点 \mathbf{R}_i 处自旋为 σ 的波函数为 α 轨道的原子轨道波函数的电子产生算符。
- $A_{c, i\alpha\sigma}(\mathbf{k})$ 为导带 c 、波矢 \mathbf{k} 对应的本征态在基 $\{c_{i\alpha\sigma}^\dagger\}$ 上的坐标。

可以写出 \mathbf{k} 空间中的激子配对算符

$$\begin{aligned} \text{Singlet} \quad \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}S}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}v\downarrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}v\uparrow} \right) \\ \text{Triplet} \quad \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}T}^{\dagger, 0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}v\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}v\uparrow} \right) \\ \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}T}^{\dagger, 1} &= c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}v\uparrow}, \quad \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}T}^{\dagger, -1} = c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}v\downarrow} \end{aligned} \quad (11)$$

和超导类比，计算 $\langle \Delta_{ij}^\dagger \Delta_{kl} \rangle$ ，再通过单电子近似过渡到 \mathbf{k} 空间。

多体系统的 \mathbf{k} 空间？

3 DOWNFOLDING

3.1 实空间

计算单粒子等时关联矩阵

$$M_{\alpha\beta} = \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle \quad (12)$$

对角化后取本征值谱的主导阶

$$\mathbf{M} = \sum_{n=1}^N \lambda_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \approx \sum_{n=1}^{N_c} \lambda_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (13)$$

对应得到 $|\psi_n\rangle, n \leq N_c$ 张成子空间的投影算符 $P = \sum_{n=1}^{N_c} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ 。

物理含义 单粒子等时关联矩阵 \mathbf{M} 的可以看做态 $\{c_{\alpha}|\Psi\rangle\}$ 这组向量的 Gram 矩阵，其正交相似对角化可以看作 Gram 矩阵的相合变换（Unitary 矩阵的 $A^T = A^{-1}$ ）性质。

假设将 \mathbf{M} 对角化得到本征值 λ_n ¹，本征态 $c_n|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\Psi\rangle$ 。因此对角化过程等价于寻找新的一组电子湮灭算符 $\{c_n\}$ ，满足

$$\langle \Psi | c_m^{\dagger} c_n | \Psi \rangle = \delta_{n,m} \langle \hat{n}_n \rangle \quad (14)$$

即态 $|\Psi\rangle$ 在新的电子湮灭算符 $\{c_n\}$ 对应的电子能级上满足

1. $\lambda_n = \langle \hat{n}_n \rangle$ ，占据数逐级递减。
2. $\langle \hat{n}_n \rangle_{n \neq m} = 0$ ，不同能级的电子之间无 hopping。

若满足 $\lambda_n \approx 0, n \geq N_c$ ，则可以在 N_c 处截断，因为以后的能级占据数为 0。

由于 c_n 在实空间的直观性较差，因此可以对 c_n 进行重新排列组合，比如选取 Lattice 上的个 N_c 个点，构造此点的 Wannier 函数。数学表述为

构造 Wannier 函数 以 $\{c_{\alpha}\}$ 为基， c_n 可表示为向量形式 $\mathbf{c}_n \in \mathcal{R}^{N \times 1}$ 。选择 $\{\alpha\}$ 中的 N_c 个点 $\{m\}$ ，重新构造向量 \mathbf{C}_m ，满足

1. 在第 $\{m\}$ 上取值最大，其它取值尽量能小。
2. 不同 \mathbf{C}_m 正交。

参考文献 [1] 中展示了完成以上要求的方法，最终能得到转移矩阵 A ，联系着 downfolding Wannier 函数与原 Wannier 函数

$$c_i = \sum_j A_{ij} C_j \Leftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_N \end{pmatrix} \quad (15)$$

可以看作是不同能带对应的电子湮灭算符将原 Wannier 电子的湮灭算符进行展开。

在向量表示下，转移矩阵 A 可以根据 C_m 的向量表示直接求得。

$$A \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 & \mathbf{C}_2 & \cdots & \mathbf{C}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 & \mathbf{c}_2 & \cdots & \mathbf{c}_N \end{pmatrix} \equiv I \Leftrightarrow A = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 & \mathbf{C}_2 & \cdots & \mathbf{C}_N \end{pmatrix}^{-1} = \sim^T \quad (16)$$

通过此技术，可以得到最终的 Downfolding Wannier 函数电子对应的湮灭算符 $C_j = \sum_i A_{ij} c_i$ 。

¹按照降序排列

3.2 k 空间

假设系统相互作用不很强，可以单电子近似（Sing.Elec.Appr.）下的能带还近似成立，即

$$H_{S.E.A.} = \sum_{n,\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) c_{n\mathbf{k}}^\dagger c_{n\mathbf{k}} \quad (17)$$

$c_{n\mathbf{k}}$ 为 Bloch 电子的湮灭算符。

$$c_{n\mathbf{k}} = \sum_{i,\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} A_{n,\alpha}(\mathbf{k}) c_{i,\alpha} \quad (18)$$

c_i 为位置的 \mathbf{R}_i 中第 α 个轨道的 Wannier 电子的湮灭算符。

在选定能带以后，根据 $c_{n\mathbf{k}}$ 在基 $\{c_i\}$ 上的向量表示 $\mathbf{c}_{n\mathbf{k}}$ ，利用文献 [1] 中提供的技术，可以得到系统 Downfolding 后的 Wannier 函数 C_j ，满足

$$c_i = \sum_j^{N_c} A_{ij} C_j + \text{other bands} \quad (19)$$

其中因为我们 downfolding 过程中只考虑前 N_c 列对应的忽略了其它能带的贡献，将上式代入系统的哈密顿量

$$H = \sum_n \sum_{\substack{\langle i,j \rangle_n \\ \alpha,\beta,\sigma}} t_n c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} + \sum_n \sum_{\substack{\langle i,j \rangle_n \\ \alpha,\beta,\sigma,\sigma'}} V_n n_{i\alpha\sigma}^\dagger n_{j\beta\sigma'} \quad (20)$$

从而可以得到 Downfolding 后的哈密顿量。

3.3 Differences

两种 Downfolding 的差别仅在于系统主导本征态的确定方法不同：

1. $A_{n,\alpha}(\mathbf{k})$ ：从第一性原理的角度出发计算**单电子近似成立**的前提下的主导本征态。认为系统单电子近似依然近似成立（即能带依然存在）的条件下。等价于认为系统的基态就存在于这些本征态之间。
2. $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ ：计算出系统的基态以后**面向基态**计算主导本征态。在多体系统中的正规做法（如果蒋晟韬的方法正确）下严格成立。

参考文献

- [1] Shengtao Jiang, Douglas J. Scalapino, and Steven R. White. Density matrix renormalization group based downfolding of the three-band hubbard model: Importance of density-assisted hopping. *Phys. Rev. B*, 108:L161111, Oct 2023. [3.1](#), [3.2](#)
- [2] Alexander Wietek. Fragmented cooper pair condensation in striped superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 129:177001, Oct 2022. [1.2](#)