1 APPENDIX

1.1 Appendix1::Campbell Baker Hausdorff formula1

演算子 A，B に対して

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2}[A, [A, B]] + \cdots \tag{1}$$

が成立する．

1.2 Appendix2::Campbell Baker Hausdorff formula2

$[A, B] = c$ が c 数である場合に

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{c/2} \tag{2}$$

が成立する．

1.3 Appendix3::波数表示とサイト表示の変換

波数表示とサイト表示のオペレーター $c_{k\sigma}$ および $c_{i\sigma}$ の変換は，

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikr_i} c_{k\sigma} \tag{3}$$

と与えられる．ただし r_i はサイトのベクトル，N はサイトの数である．この変換は canonical である．

同様に，クーロン相互作用のフーリエ変換は

$$V_c(r) = \frac{1}{N} \sum_q V_c(q) e^{iqr} \tag{4}$$

2 Hamiltonian

2.1 問題の設定

単一バンドの電子，および多バンドのフォノンを含む波数表示のハミルトニアン

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} + H_c \tag{5}$$

$$H_e = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} a^\dagger_{k\sigma} a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma, k'\sigma', q} V(q) a^\dagger_{k+q,\sigma} a_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} \tag{6}$$

$$H_{ph} = \sum_q \omega_{q\nu} \left(d^\dagger_{q\nu} d_{q\nu} + \frac{1}{2} \right) \tag{7}$$

$$H_{e-ph} = \sum_{kq\nu\sigma} g_\nu(k, q) a^\dagger_{k+q,\sigma} a_{k\sigma} \left[d_{\nu q} + d^\dagger_{\nu-q} \right] \tag{8}$$

$$H_c = \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{kk'q} V(q) a^\dagger_{k+q,\sigma} a^\dagger_{k'-q,\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma} \tag{9}$$

から始めよう．ここで $a_{k\sigma}$ は波数 k およびスピン σ を持つ電子の operator，$d_{q\nu}$ はフォノンバンド ν および波数 q をもつフォノンの operator である．また g は electron-phonon-coupling で，電子スピンに依存しないとしてある．bipolaron を議論するには，その定義上電子をサイト表示で議論を進める方が便利である．そこで appendix に示したフーリエ変換をすることで，

$$H = H_{hop} + H_c + H_{e-ph} - H_{ph} \tag{10}$$

LF の原論文に従って H_{ph} のみ符号を逆にとってあることに注意．ただし，各項は

$$H_{hop} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \tag{11}$$

$$H_c = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j \tag{12}$$

$$H_{ph} = \sum_q \omega_{q\nu} \left(d^\dagger_{q\nu} d_{q\nu} + \frac{1}{2} \right) \tag{13}$$

$$H_{e-ph} = \sum_{iq\nu} \omega_q n_i \left(u^*_{i\nu}(q) d_{q\nu} + u_{i\nu}(q) d^\dagger_{q\nu} \right) \tag{14}$$

と定義される．t_{ij} は hopping integral でバンドエネルギーのフーリエ変換であり，電子数の演算子 $n_{i\sigma} = a^\dagger_{i\sigma} a_{i\sigma}$ および $n_i = \sum_\sigma n_{i\sigma}$ を用いた．また，u は electron-phonon-coupling g のフーリエ変換と関連する量で

$$u_{i\nu}(q) = -\frac{1}{\omega_{q\nu}} g^*_\nu(q) e^{-iqr_i} \tag{15}$$

と定義されている．g がスピン依存性を持たないので，u もスピン依存性を持たない．本来は g が k 依存性を持つので，H_{e-ph} には $a^\dagger_i a_j$ のような項も含まれるのだが，以下で t_{ij} が十分小さいような領域を考えるので，このような領域では無視しても良い．(実際に考えても良いが，それはあまり大きな影響をもたらさないらしい．)

このハミルトニアン (10) から LF 変換および Second Canonical Transformation（摂動論）によって bipolaron operator で書かれた有効ハミルトニアンを導出することが目的である．

3 Lang-Firsov-Transformation

3.1 LF 変換の定義

第一段階では，LF 変換を用いて phonon operator に関する一次の項を消し去る．これは LF の原論文に従って，以下のように定義されている．

$$H' = e^{-S} H e^S \tag{16}$$

$$S = \sum_{i\sigma} a^\dagger_{i\sigma} a_{i\sigma} P_i \tag{17}$$

$$P_i = \sum_{q\nu} \left(b^\dagger_{q\nu} u_{i\nu}(q) - b_{q\nu} u^*_{i\nu}(q) \right) \tag{18}$$

ただし S が anti Hermitian で $S^\dagger = -S$ を満たすことに注意しよう．この変換の元で，electron および phonon の operator も以下のように変換する．

$$
\begin{aligned}
\tilde{a}_{i\sigma} &= a_{i\sigma} e^{P_i} && (19)\\
\tilde{a}^\dagger_{i\sigma} &= a^\dagger_{i\sigma} e^{-P_i} && (20)\\
\tilde{b}_{q\nu} &= b_{q\nu} + \sum_{i\sigma} u_{i\nu}(q) n_{i\sigma} && (21)
\end{aligned}
$$

この変換がカノニカルであることに注意しよう．$\tilde{a}$ は引き続きフェルミオン，$\tilde{b}$ は引き続きボソンである．この時 $\tilde{a}$ は格子を纏った電子（polaron）として，$\tilde{b}$ は電子密度 n 周りの振動と解釈できる．

3.2 H_{hop} の変換

さて，実際にハミルトニアンの各項を変換してみよう．どの項の変換にも baker hausdorff 公式および各種演算子の交換関係のみを用いる．

まず H_{hop} の変換から考える．この subsection では，$(i\sigma)$ および $(j\sigma)$ というまとまりしか出てこないため，簡略化のため

$$
l = (i\sigma) \qquad\qquad m = (j\sigma) \tag{22}
$$

と置くことにして，さらに $A = c^\dagger_l c_m$ と置く．関係式

$$
\begin{aligned}
[n_l, A] &= A && (23)\\
[n_m, A] &= -A && (24)\\
& && (25)
\end{aligned}
$$

を用いる．すると

$$
[S, A] = [n_l P_i + n_m P_j, A] = (P_i - P_j)\, A \tag{26}
$$

さらに，もう一回 S を作用させると

$$
\begin{aligned}
[S, [S, A]] &= [n_l P_i + n_m P_j, (P_i - P_j) A] && (27)\\
&= (P_i - P_j)^2\, A && (28)
\end{aligned}
$$

を得る．以下同様に一回 S を作用させるごとに因子 $P_i - P_j$ がかかるので，baker hausdorff の公式によって（S の符号に注意して）

$$
\begin{aligned}
\tilde{H}_{hop} &= e^{-S} H_{hop} e^{S} && (29)\\
&= \sum_{ij\sigma} t_{ij} \left(A - (P_i - P_j) A + (P_i - P_j)^2 A - \cdots \right) && (30)\\
&= \sum_{ij\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} e^{P_j - P_i} && (31)
\end{aligned}
$$

と求まる．こうして $\tilde{H}_{hop}$ には電子とフォノンの項が残ることになり，これを次節の Second Canonical Transformation でさらに変形していくことになる．また，以下では簡単のために

$$
\sigma_{ij} = t_{ij} e^{P_j - P_i} \tag{32}
$$

と置くことにする．こうすると (31) は

$$\tilde{H}_{hop} = \sum_{ij\sigma} \sigma_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \tag{33}$$

である．

特に，ホッピングのうちオンサイトのもの t_{ii} に関する項は指数因子が打ち消しあうので，これだけ分けて書けば

$$\tilde{H}_{hop} = \sum_{i\neq j\sigma} \sigma_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} t_{ii} c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} \tag{34}$$

である．

3.3 H_c の変換

H_c の変換にも baker hausdorff が使えるが，こちらの方がより簡単である．というのも

$$[S, n_{i\sigma} n_{j\sigma'}] = 0 \tag{35}$$

だから，$\tilde{H}_c = H_c$ となるためである．これは，LF 変換では a に関する密度の演算子が不変で $\tilde{n} = n$ であることの直接の帰結である．従って

$$\tilde{H}_c = \sum_{i\sigma j\sigma'} V_{ij} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \tag{36}$$

である．

3.4 H_{ph} の変換

フォノンエネルギーの項を考える．

$$\tilde{H}_{ph} = e^{-S} H_{ph} e^{S} \tag{37}$$

$$\tag{38}$$

において，

$$\begin{aligned}
\left[S, d^\dagger_q d_q\right] &= \sum_{i\sigma} a^\dagger_{i\sigma} a_{i\sigma} \left[\sum_{q\nu} \left(d^\dagger_{q\nu} u_{i\nu}(q) - d_{q\nu} u^*_{i\nu}(q) \right), d^\dagger_{q\nu} d_{q\nu} \right] \qquad (39) \\
&= \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \left(-d^\dagger_{q\nu} u_{i\nu}(q) - d_{q\nu} u^*_{i\nu}(q) \right) \qquad (40)
\end{aligned}$$

従って

$$\begin{aligned}
\left[S, \left[S, d^\dagger_{q\nu} d_{q\nu}\right]\right] &= \left[\sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \sum_{q\nu} \left(d^\dagger_{q\nu} u_{i\nu}(q) - d_{q\nu} u^*_{i\nu}(q) \right), \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \left(-d^\dagger_{q\nu} u_{i\nu}(q) - d_{q\nu} u^*_{i\nu}(q) \right) \right] \qquad (41) \\
&= \sum_{i\sigma, j\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \left[d^\dagger_{q\nu} u_{i\nu}(q) - d_{q\nu} u^*_{i\nu}(q), -d^\dagger_{q\nu} u_{j\nu}(q) - d_{q\nu} u^*_{j\nu}(q) \right] \qquad (42) \\
&= \sum_{i\sigma, j\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \left(u^*_{i\nu}(q) u_{j\nu}(q) + u_{i\nu}(q) u^*_{j\nu}(q) \right) \qquad (43)
\end{aligned}$$

これ以上 S との交換関係をとっても，最早フォノン operator d が残っていないので 0 になる．従って，baker hausdorff 公式は（S の符号に注意して）

$$\tilde{H}_{ph} = H_{ph} - [S, H_{ph}] + \frac{1}{2}[S, [S, H_{ph}]] \tag{44}$$

$$= \sum_q \omega_{q\nu} \left(d_q^\dagger d_q + \frac{1}{2} - \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \left(-d_q^\dagger u_m(q) - d_q u_m^*(q) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i\sigma} \left(u_{i\nu}^*(q) u_{j\nu}(q) + u_{i\nu}(q) u_{j\nu}^*(q) \right) \right) \tag{45}$$

$$= H_{ph} + H_{e-ph} + \frac{1}{2} \sum_{q,i\sigma,j\sigma'} \omega_{q\nu} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \left(u_{i\sigma}^*(q) u_{j\sigma'}(q) + u_{i\sigma}(q) u_{j\sigma'}^*(q) \right) \tag{46}$$

となる．

3.5 H_{e-ph} の変換

最後に H_{e-ph} の変換を調べよう．baker hausdorff を用いるため交換関係を計算してみると

$$\left[S, n_{i\sigma} \left(u_{i\nu}^* d_{q\nu} + u_{i\nu} d_{q\nu}^\dagger \right)\right] = \sum_{l\sigma'} n_{l\sigma'} n_{i\sigma} \left[u_{l\nu}(q) d_{q\nu}^\dagger - u_{l\nu}^*(q) d_{q\nu}, u_{i\nu}^*(q) d_{q\nu} + u_{i\nu}(q) d_{q\nu}^\dagger \right] \tag{47}$$

$$= -\sum_{l\sigma'} n_{l\sigma'} n_{i\sigma} \left(u_{i\nu}^*(q) u_{l\nu}(q) + u_{l\nu}^*(q) u_{i\nu}(q) \right) \tag{48}$$

この式にはフォノンの operator は残っておらず，さらに $[n_{i\sigma}, n_{l\sigma'}] = 0$ に注意すると，さらにこれと S の交換関係をとると 0 になってしまう．従って baker hausdorff の公式により

$$\tilde{H}_{e-ph} = e^{-S} H_{e-ph} e^S \tag{49}$$

$$= H_{e-ph} + \sum_{q\nu i\sigma l\sigma'} \omega_{q\nu} n_{l\sigma'} n_{i\sigma} \left(u_{i\nu}^*(q) u_{l\nu}(q) + u_{l\nu}^*(q) u_{i\nu}(q) \right) \tag{50}$$

となる．ここで $\tilde{H}_{ph}$ の式 (46) 中の二項目 H_{ph} および三項目と纏められて

$$\tilde{H}_{ph} - \tilde{H}_{e-ph} = H_{ph} - \frac{1}{2} \sum_{q\nu,i\sigma,j\sigma'} \omega_{q\nu} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \left(u_{i\nu}^*(q) u_{j\nu}(q) + u_{i\nu}(q) u_{j\nu}^*(q) \right) \tag{51}$$

となる．後のために $(i\sigma) = (j\sigma')$ の項とそれ以外の項に分けると

$$\tilde{H}_{ph} - \tilde{H}_{e-ph} = H_{ph} - \frac{1}{2} \sum_{q,i\sigma,j\sigma'} \omega_{q\nu} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \left(u_{i\sigma}^*(q) u_{j\sigma'}(q) + u_{i\sigma}(q) u_{j\sigma'}^*(q) \right) \tag{52}$$

$$= H_{ph} - \sum_{qi\sigma} \omega_{q\nu} n_{i\sigma} \left| u_{i\sigma}(q) \right|^2 - \frac{1}{2} \sum_{q,i\neq j,\sigma\neq\sigma'} \omega_{q\nu} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \left(u_{i\sigma}^*(q) u_{j\sigma'}(q) + u_{i\sigma}(q) u_{j\sigma'}^*(q) \right) \tag{53}$$

となる．ただし最後の変形ではフェルミオンに対して $n^2 = n$ となることを利用してある．こうして得られた n に比例する項は，ホッピング $\tilde{H}_{hop}$ の式 (34) から来る t_{ii} と合わせて

$$\sum_{i\sigma} (t_{ii} - E_p) n_{i\sigma} \tag{54}$$

$$E_p = -\sum_{qi\sigma} \omega_{q\nu} \left| u_{i\sigma}(q) \right|^2 \tag{55}$$

と書ける．E_p はポーラロンレベルシフトと呼ばれる量である．

3.6 LF 変換まとめ

LF 変換自体は厳密な関係式であり，我々は結局変換されたハミルトニアン

$$\tilde{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} e^{P_j - P_i} + \sum_q \omega_{q\nu} \left(d^\dagger_{q\nu} d_{q\nu} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} n_i n_j \tag{56}$$

を得る．ただし相互作用係数は

$$v_{ij} = V_{ij} - \sum_q \omega_{q\nu} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \left(u^*_{i\sigma}(q) u_{j\sigma'}(q) + u_{i\sigma}(q) u^*_{j\sigma'}(q) \right) \tag{57}$$

と定義した．

ハミルトニアン (56) において，c および d は裸の電子およびフォノンではなく，ポーラロンおよび変形されたフォノンと解釈するのが正しい．というのももともとのハミルトニアン H における $\tilde{c}$ および $\tilde{d}$ の関係と，変形されたハミルトニアン $\tilde{H}$ における c および d の関係は全く同じだからである．そうすると，v_{ij} はポーラロンポーラロン相互作用の係数と考えることができる．この係数はクーロン反発力とフォノンを媒介した引力との比較で決まる．

また，式 (56) においてオンサイトの項を露わに取り出した

$$\tilde{H} = \sum_{i\sigma} \left(t_{ii} + V_{ii} - E_p \right) n_{i\sigma} + \sum_{i\neq j\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} e^{P_j - P_i} + \sum_q \omega_{q\nu} \left(d^\dagger_{q\nu} d_{q\nu} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i\neq j} v_{ij} n_i n_j \tag{58}$$

も有用な関係式である．

4 Second Canonical Transformation

4.1 変換の定義

簡略化のため

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{V} \tag{59}$$

$$\tilde{H}_0 = \sum_q \omega_{q\nu} \left(d^\dagger_{q\nu} d_{q\nu} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} n_i n_j \tag{60}$$

$$\tilde{V} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} e^{P_j - P_i} \tag{61}$$

と置く．LF 変換されたハミルトニアンにはまだ c と d がカップリングされた項が含まれており，これを除去する必要がある．以下 strong coupling の状態 $|t| << |v|$ に話を限ることにすると，$\tilde{V}$ を $\tilde{H}_0$ に対する摂動として扱うことができる．

ここで多少物理的な考察が必要となる．バイポーラロン状態が生成されるかどうかは，バイポーラロンの束縛エネルギー

$$\Delta \simeq 2E_p - V_0 \tag{62}$$

に依存する．ただし V_0 はオンサイトのクーロン反発力である．これとポーラロンーポーラロン相互作用 v が，引力的ではあるが弱い場合つまり

$$\Delta \leq W \tag{63}$$

の場合，ポーラロンはクーパーペアを作って BCS 型の超電導を起こす．一方で v が強い場合

$$\Delta \geq W \tag{64}$$

にはバイポーラロン（同じサイトにポーラロンが二つ存在する状態）が生成されて，バイポーラロン超電導を起こす．今考えるのは後者の場合である．

このような領域を想定してバイポーラロン超電導を論じるために，$\tilde{H}_0$ の固有状態をバイポーラロン状態に絞って議論する．これは十分低温の領域 $T \leq \Delta$ において有効である．すると $\tilde{V}$ の一次は bipolaron を壊してしまうが $\tilde{V}$ の二次にはその恐れはない．そこで $\tilde{V}$ の一次の項を消してしまうような Canonical Transformation によって bipolaron の運動は記述できると期待される．このような変換

$$H_b = e^{S_2}\tilde{H}e^{-S_2} \tag{65}$$

は，baker hausdorff 公式

$$H_b = \tilde{H}_0 + \tilde{V} + \left[S, \tilde{H}_0\right] + \left[S, \tilde{V}\right] + \frac{1}{2}\left[S, \left[S, \tilde{H}_0\right]\right] + \cdots \tag{66}$$

において

$$\tilde{V} + \left[S, \tilde{H}_0\right] = 0 \tag{67}$$

となるような S を取ることによって達成され，この時ハミルトニアンは 3 次以上の項を無視することによって

$$H_b \simeq \tilde{H}_0 + \frac{1}{2}\left[S, \tilde{V}\right] \equiv \tilde{H}_0 + H_{int} \tag{68}$$

と近似することができる．また，このような S の行列要素は

$$\langle n|S|m\rangle = \frac{\langle n|\tilde{V}|m\rangle}{E_n - E_m} \tag{69}$$

で与えられることが知られている．ここに $\tilde{V}$ の具体的な表式 (61) を代入して

$$\langle f|S_2|p\rangle = \sum_{ij} \frac{\langle f|\sigma_{ij}c_i^\dagger c_j|p\rangle}{E_f - E_p} \tag{70}$$

ただし $|f\rangle$ および $|p\rangle$ は H_0 の固有状態であり，E_f などはその固有エネルギーである．

4.2 非摂動ハミルトニアンの固有状態

非摂動ハミルトニアン $\tilde{H}_0$ の固有状態は，ポーラロン状態 $|polaron\rangle$ とフォノン状態 $|phonon\rangle$ の直積で

$$|f\rangle = |polaron\rangle\,|phonon\rangle$$

と書ける．すなわち polaron の状態とフォノンの状態を指定してやれば良い．

ここで，polaron 状態について考えよう．ハミルトニアン H_0 において 2 サイト 2polarons の場合を考えよう．するとこのハミルトニアンは対角化できて，そのエネルギー準位は以下のようになる．

ここでパラメータの値が上述の通りであれば確かに bipolaron 状態が基底状態となり，polaron が二つの状態とのエネルギーの差は

$$\Delta_{ij} =$$

と書ける．以下ではこの Δ を束縛エネルギーとして扱うことにしよう．

4.3 $\tilde{V}$ の変換

ハミルトニアン (68) に従って，H_{int} の行列要素を計算しよう．

$$\begin{aligned}
\langle f|H_{int}|i\rangle &= \frac{1}{2}\sum_p \left(\langle f|S|p\rangle\langle p|\tilde{V}|i\rangle - \langle f|\tilde{V}|p\rangle\langle p|S|i\rangle\right) && (71)\\
&= \frac{1}{2}\sum_p \left(\frac{\langle f|\tilde{V}|p\rangle\langle p|\tilde{V}|i\rangle}{E_f - E_p} - \frac{\langle f|\tilde{V}|p\rangle\langle p|\tilde{V}|i\rangle}{E_p - E_i}\right) && (72)\\
&= \frac{1}{2}\sum_p \left(\frac{1}{E_f - E_p} + \frac{1}{E_i - E_p}\right)\langle f|\tilde{V}|p\rangle\langle p|\tilde{V}|i\rangle && (73)\\
& && (74)
\end{aligned}$$

ただしここで，始状態 $|i\rangle$ および終状態 $|f\rangle$ は bipolaron を，中間状態 $|p\rangle$ は polaron を含む．これを満たすためには，H_{int} に含まれる $\tilde{V}\tilde{V}$ において 1 つ目の $\tilde{V}$ で 1 つのポーラロンがサイト i からサイト j に移動し，2 回目の $\tilde{V}$ においてサイト i に残っているスピン逆向きのポーラロンがサイト j に移動しなければばならない．

式 (73) にもまだフォノンの項は残っているが，これを除去するため，自由フォノンに関して平均を取ってしまうことにする．$|i\rangle$ と $|f\rangle$ でフォノンの数は同じ diagonal な項を考えることにしよう．そこで

$$E_{f'} - E_p = E_f - E_p \simeq -\Delta + \sum_q \omega_{q\nu}\left(n_q^f - n_q^p\right) \tag{75}$$

とおけることになる．ただし，Δ は先に述べたようにバイポーラロン一つをポーラロン二つに分解するために必要なエネルギーであり，本来は（おそらく）サイトに依存する量であるが，ここでは同じ定数として扱うことにする．

フォノン部分の平均化をすると，フォノン部分に関する式は

$$\begin{aligned}
&\langle\frac{1}{2}\sum_p\left(\frac{1}{E_f - E_p} + \frac{1}{E_i - E_p}\right)\sigma_{ij}|p\rangle\langle p|\sigma_{kl}\rangle\\
=&\sum_n e^{-\beta E_n}\sum_p\left(\frac{1}{-\Delta + \sum_{q\nu}\omega_{q\nu}\left(n_{q\nu}^f - n_{q\nu}^p\right)}\right)\langle f|\sigma_{ij}|p\rangle\langle p|\sigma_{kl}|f\rangle
\end{aligned}$$

$\langle\rangle$ は自由フォノンによる平均化

$$\langle A\rangle = \frac{1}{a}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H_{ph}}A\right) \tag{76}$$

を意味する．分母を出すために e^{iHt} の積分を考えよう．つまり

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t e^{iH_{ph}t+\delta t}|f\rangle = \frac{1}{iE_f}|f\rangle$$

を用いると，

$$
\begin{aligned}
& i\sum_f e^{-\beta E_f}\int_0^\infty \mathrm{d}te^{-i\Delta t}\sum_p \langle f|e^{iH_{ph}t}\sigma_{ij}e^{-iH_{ph}t}|p\rangle \langle p|\sigma_{kl}|f\rangle \\
=& i\sum_f e^{-\beta E_f}\int_0^\infty \mathrm{d}te^{-i\Delta t} \langle f|e^{iH_{ph}t}\sigma_{ij}e^{-iH_{ph}t}\sigma_{kl}|f\rangle \\
=& i\int_0^\infty \mathrm{d}te^{-i\Delta t} \langle e^{iH_{ph}t}\sigma_{ij}e^{-iH_{ph}t}\sigma_{kl}\rangle
\end{aligned}
$$

ただし状態 $|p\rangle$ に関する完全性関係を使った．さらにハイゼンベルグ表示の演算子

$$\sigma(t) = e^{iH_{ph}t}\sigma e^{-iH_{ph}t} \tag{77}$$

を導入して以下これを

$$T_{ij,kl} = i\int_0^\infty dte^{-(i\Delta+\delta)t}\langle \sigma_{ij}(t)\sigma_{kl}(0)\rangle \tag{78}$$

と書くことにすると，フォノンについての平均化をとった polaron のみについてのハミルトニアンは

$$H_{int} = -\sum_{ijkl} T_{ij,kl}c_i^\dagger c_j c_k^\dagger c_l \tag{79}$$

とかけることになる．ただし，和 $(ijkl)$ は許される中間状態 $|p_{polaron}\rangle$ についてのみ取らなければならない．この点を次節で議論することにする．

4.4 bipolaron operator と Effective Hamiltonian

次にハミルトニアン全体を (singlet)bipolaron の operator で書き換えるのが良い．これは

$$b_i^\dagger = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}^\dagger \tag{80}$$

$$b_i = a_{i\downarrow}a_{i\uparrow} \tag{81}$$

で定義され，これもフェルミオンである．実際交換関係は

$$\left\{b_m, b_m^\dagger\right\} = 1 \tag{82}$$

$$\left[b_m, b_{m'}^\dagger\right] = 1 \tag{83}$$

$$\tag{84}$$

で与えられる．$\tilde{H}_0$ の基底状態として bipolaron 状態のみを考えているので，あるサイト i にポーラロンが 1 つあれば，必ず同じサイト i にもう一つスピンが反対向きのポーラロンが存在する．つまり

$$n_{i\sigma} = n_{i\sigma}n_{i,-\sigma} \tag{85}$$

が成立している．ただし $-\sigma$ は σ と逆向きのスピンを表す．従ってポーラロンの二体相互作用は

$$n_in_j = \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma}n_{j\sigma'} \tag{86}$$

$$= \sum_{\sigma\sigma'} n_{i,\sigma}n_{i,-\sigma}n_{j,\sigma'}n_{j,-\sigma'} \tag{87}$$

$$= 4b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j \tag{88}$$

とかけることになる．

次に H_{int} は bipolaron のホッピングを表す項と，bipolaron 相互作用（およびオンサイトエネルギー）を表す項に分けることができる．まずはホッピング項から考えよう．サイト i からサイト j へのホッピングには，中間状態 $|p\rangle$ としてふた通り取りうる，つまり $\tilde{V}\tilde{V}$ に含まれる $c_{j\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}$ において一つめの $\tilde{V}$ で σ としてスピン up を取るか down を取るかのふた通りある．従って operator 部分は

$$a_{j\downarrow}^{\dagger}a_{i\downarrow}a_{j\uparrow}^{\dagger}a_{i\uparrow}+a_{j\uparrow}^{\dagger}a_{i\uparrow}a_{j\downarrow}^{\dagger}a_{i\downarrow}=2b_{i}^{\dagger}b_{i} \tag{89}$$

となり，係数は $T_{ij,ij}$ である．

次に相互作用項は 1 回目の $\tilde{V}$ で polaron がサイト i から j に移った後，2 回目の $\tilde{V}$ でサイト j から i に戻ってくれば良い．従って operator 部分は

$$\begin{aligned}a_{i\uparrow}^{\dagger}a_{j\uparrow}a_{j\uparrow}^{\dagger}a_{i\uparrow}+a_{i\downarrow}^{\dagger}a_{j\downarrow}a_{j\downarrow}^{\dagger}a_{i\downarrow}&=n_{i\uparrow}\left(1-n_{j\uparrow}\right)+n_{i\downarrow}\left(1-n_{j\downarrow}\right) &(90)\\&=2n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}-2n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} &(91)\\&=2b_{i}^{\dagger}b_{i}-2b_{i}^{\dagger}b_{i}b_{j}^{\dagger}b_{j} &(92)\end{aligned}$$

となる．ただし式 (93) を用いた．この変形からバイポーラロン相互作用の項は，サイト $i\to j\to i$ のホッピングにおいてサイト j にバイポーラロンがあってはならないことにより生じたものであることがわかる．係数は $T_{ij,ji}$ であるが，(ij) の和をとるときにダブルカウンティングが発生することに注意しよう．

以上から，ハミルトニアン H_b は bipolaron の operator で

$$H_{b}=\frac{1}{2}\sum_{ij}4v_{ij}\hat{N}_{i}\hat{N}_{j}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}2T_{ij,ji}\hat{N}_{i}\hat{N}_{j}+\sum_{i}\left(-\sum_{j}T_{ij,ji}\right)\hat{N}_{i}-2\sum_{ij}T_{ij,ij}b_{i}^{\dagger}b_{j} \tag{93}$$

とかけることになる．ただし，バイポーラロンの密度演算

$$\hat{N}_{i}=b_{i}^{\dagger}b_{i} \tag{94}$$

を定義した．また，オンサイトの項を露わに分離してある．

5　ハイゼンベルグモデル

bipolaron ハミルトニアンはハイゼンベルグモデルと等価であることが知られており，それを考えることにする．ハミルトニアン

$$H_{b}=\frac{1}{2}\sum_{ij}4v_{ij}\hat{N}_{i}\hat{N}_{j}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}2T_{ij,ji}\hat{N}_{i}\hat{N}_{j}+\sum_{i}\left(-\sum_{j}T_{ij,ji}\right)\hat{N}_{i}-2\sum_{ij}T_{ij,ij}b_{i}^{\dagger}b_{j} \tag{95}$$

から出発する．ここで

$$\begin{aligned}S_{m}^{z}&=\frac{1}{2}-N_{m}\\S_{m}^{x}&=\frac{1}{2}\left(b_{m}+b_{m}^{\dagger}\right)\\S_{m}^{y}&=\frac{i}{2}\left(b_{m}-b_{m}^{\dagger}\right)\end{aligned}$$

と置くと，bipolaron 演算子の交換関係式 (82) によって，これらはスピン 1/2 の演算子である．S_m^z はサイト m の Bipolaron 密度と関連しており，1/2 なら存在せず，$-1/2$ なら存在する．

これをハミルトニアン (93) に代入すると

$$
\begin{aligned}
H_b &= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(4v_{ij}+2T_{ij,ji})\left(\frac{1}{2}-S_i^z\right)\left(\frac{1}{2}-S_j^z\right)-\sum_{i\neq j}T_{ij,ji}\hat{N}_i-2\sum_{i\neq j}T_{ij,ij}\left(S_i^x+iS_i^y\right)\left(S_j^x-iS_j^y\right)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(4v_{ij}+2T_{ij,ji})\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}S_i^z-\frac{1}{2}S_i^z-S_i^zS_j^z\right)-\sum_{i\neq j}T_{ij,ji}\left(\frac{1}{2}-S_i^z\right)-2\sum_{i\neq j}T_{ij,ij}\left(S_i^xS_j^x+iS_i^yS_j^y\right)
\end{aligned}
$$

定数部分を無視すれば，

$$
\begin{aligned}
H_{spin} &= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(4v_{ij}+2T_{ij,ji})\left(-\frac{1}{2}S_i^z-\frac{1}{2}S_i^z-S_i^zS_j^z\right)-\sum_{i\neq j}T_{ij,ji}\left(\frac{1}{2}-S_i^z\right)-2\sum_{i\neq j}T_{ij,ij}\left(S_i^xS_j^x+S_i^yS_j^y\right)\\
&= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(4v_{ij}+2T_{ij,ji})\left(-\frac{1}{2}S_i^z-\frac{1}{2}S_i^z-S_i^zS_j^z\right)+\sum_{i\neq j}T_{ij,ji}S_i^z-2\sum_{i\neq j}T_{ij,ij}\left(S_i^xS_j^x+S_i^yS_j^y\right)
\end{aligned}
$$

と描けることになる．すなわちこれは anisotropic Heisenberg model である．そこで以降簡単のため

$$
H_{spin}=\sum_{i,j}A_{ij}S_i^zS_j^z-\sum_{i,j}C_{ij}\left(S_i^xS_j^x+S_i^yS_j^y\right)-\sum_i B_iS_i^z
$$

と置くことにする．

6 平均場近似

スピンの形で書かれたハミルトニアン式 (**??**) に平均場近似を適用するに当たって，簡単のためにいくつか仮定をする．仮定を外してより一般化しても計算はできるが，結果はより複雑になる．まず，格子の形としては単純な二次元正方格子上に二種類の副格子 A，B を考えることにする．そして相互作用として最近接の A，B 間のもののみを考えることにする．また，Bipolaron 密度が保存する場合

$$
\langle S_i^z\rangle=\frac{1}{2}-n_i
$$

を考えよう．

平均場としては $\langle \mathbf{S}_m^z\rangle$ を導入する．この時の平均場の求め方には変分原理を用いる．不等式

$$
Z\geq Z_0e^{-\beta(E-E_{MF})} \tag{96}
$$

に対して試行ハミルトニアンを

$$
H_0=-\sum_i\Gamma_i\cdot S_i
$$

と置いて Γ を変分パラメータとして分配関数を最大化する．実際に計算すると平均場は

$$
\Gamma_i^x=\Gamma_i^y=2\sum_j C_{ij}\left\langle S_j^x\right\rangle
$$

$$
\Gamma_i^z=\left(B_i-2\sum_j A_{ij}\left\langle S_j^z\right\rangle\right)
$$

参考文献

[1] Lang, I. G., and Yu A. Firsov. "Kinetic theory of semiconductors with low mobility." Sov. Phys. JETP 16.5 (1963): 1301.

[2] Alexandrov, A. S., J. Ranninger, and S. Robaszkiewicz. "Bipolaronic superconductivity: thermodynamics, magnetic properties, and possibility of existence in real substances." Physical Review B 33.7 (1986): 4526.

[3] Devreese, Jozef T., and Alexandre S. Alexandrov. "Fröhlich polaron and bipolaron: recent developments." Reports on Progress in Physics 72.6 (2009): 066501.

[4] Alexandrov, A., and J. Ranninger. "Bipolaronic superconductivity." Physical Review B 24.3 (1981): 1164.

[5] Alexandrov, A., and J. Ranninger. "Theory of bipolarons and bipolaronic bands." Physical Review B 23.4 (1981): 1796.