

強相関電子系におけるホールダイナミクス とストリング励起

PRB 103, 035141 (2021)

Kazuya Shinjo¹, Shigetoshi Sota², and Takami Tohyama¹

¹Tokyo University of Science, ²RIKEN

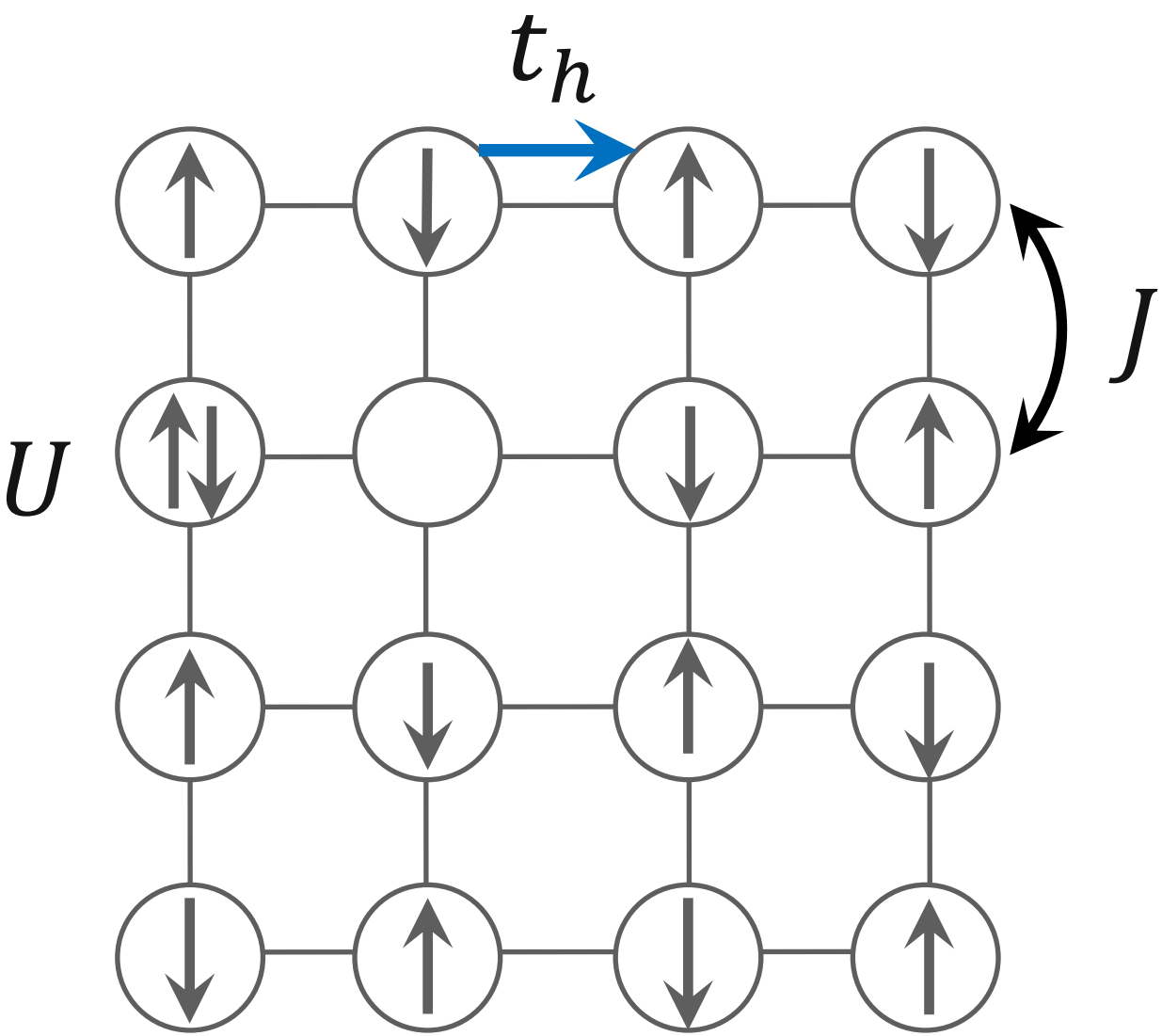
Outline

- Introduction
 - String excitations in strongly correlated electron systems
 - Mid-infrared weights of optical spectrum
 - Phase strings
- Motivation and purpose
- Results
 - Optical conductivity
 - Single-particle spectral function
- Summary

ハバード模型とその有効模型

ハバード模型

$$\mathcal{H} = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_{\langle i,j \rangle} n_{i,\uparrow} n_{j,\downarrow}$$
$$n_{i,\uparrow} = c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow}$$



強結合展開で得られる有効模型

$$\mathcal{H}^{t-J} = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \underbrace{\sum_{\langle i,j \rangle} [J_\perp (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_z S_i^z S_j^z]}_{\text{ハイゼンベルク模型}}$$

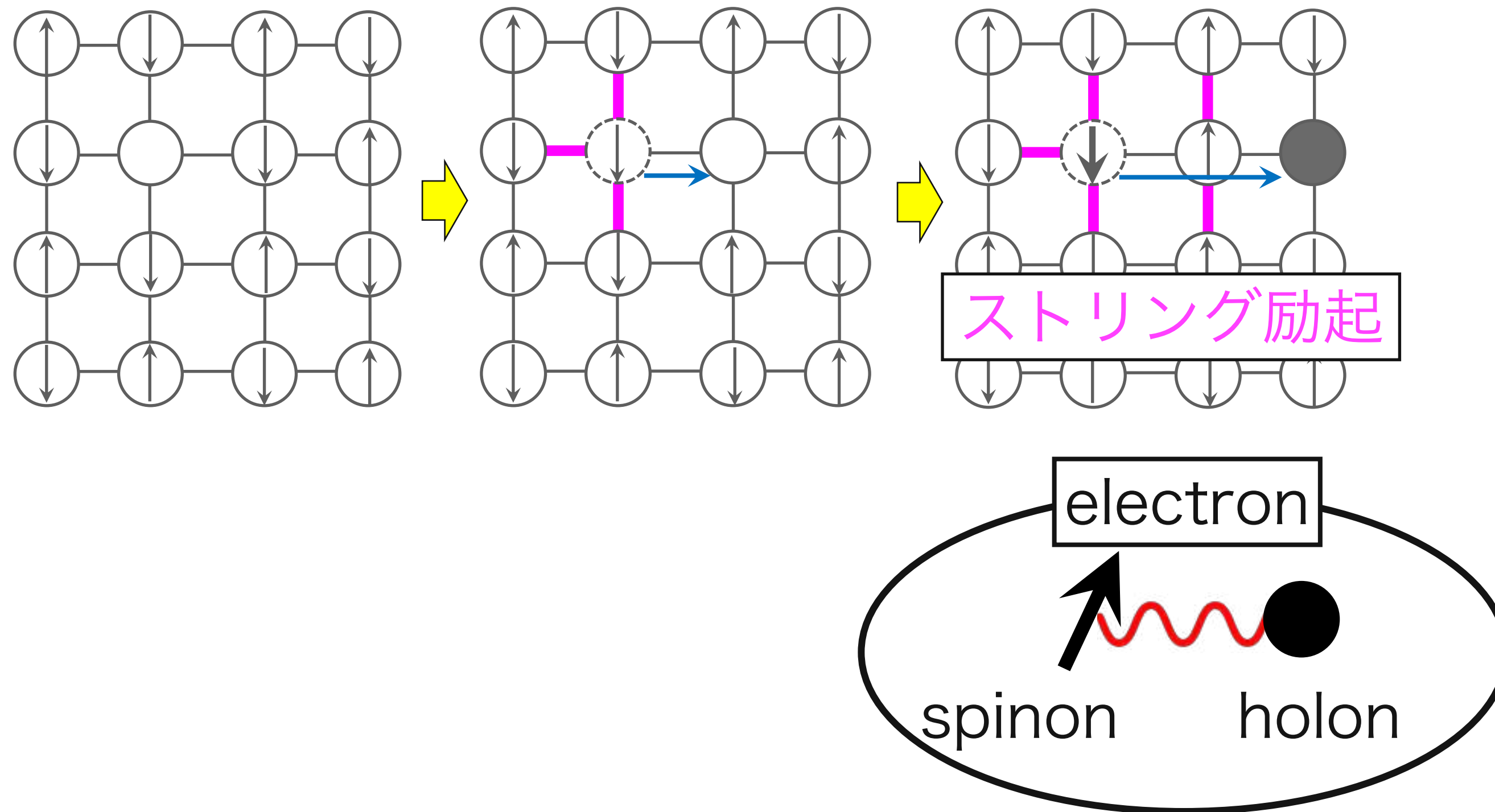
$$\mathcal{H}^{t-J_z} = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + J_z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$$

$$J_\perp, J_z > 0$$

t - J および t - J_z では二重占有が禁止される.

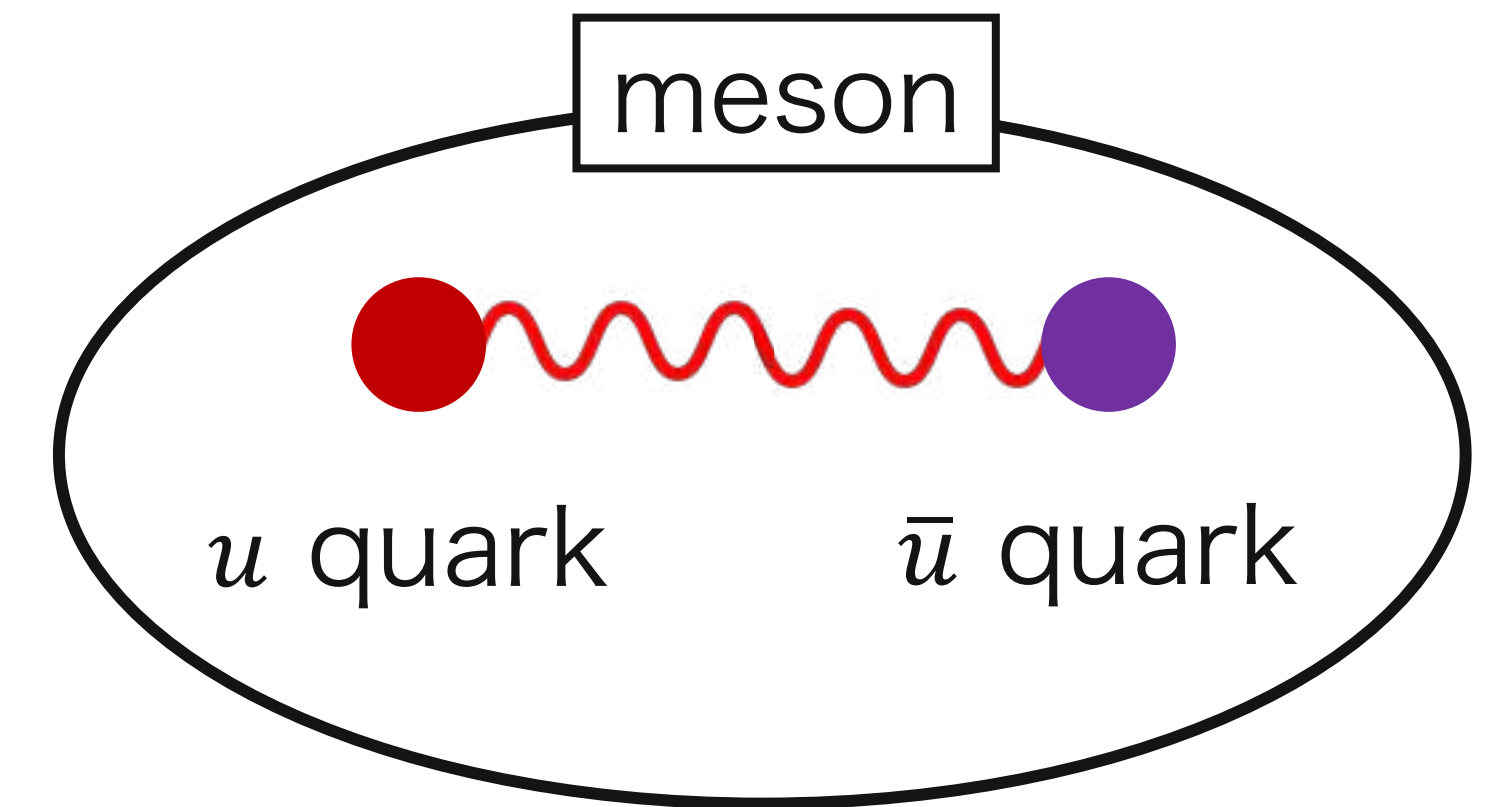
“Partons” in condensed matter and high energy physics

condensed matter physics



- spinonとholonからなる複合粒子として電子を記述.
- 反強磁性スピン交換相互作用が作り出すストリングにより spinonとholonは束縛される (閉じ込められる) .
- 一次元系ではspinonとholonは分離する.

high energy physics



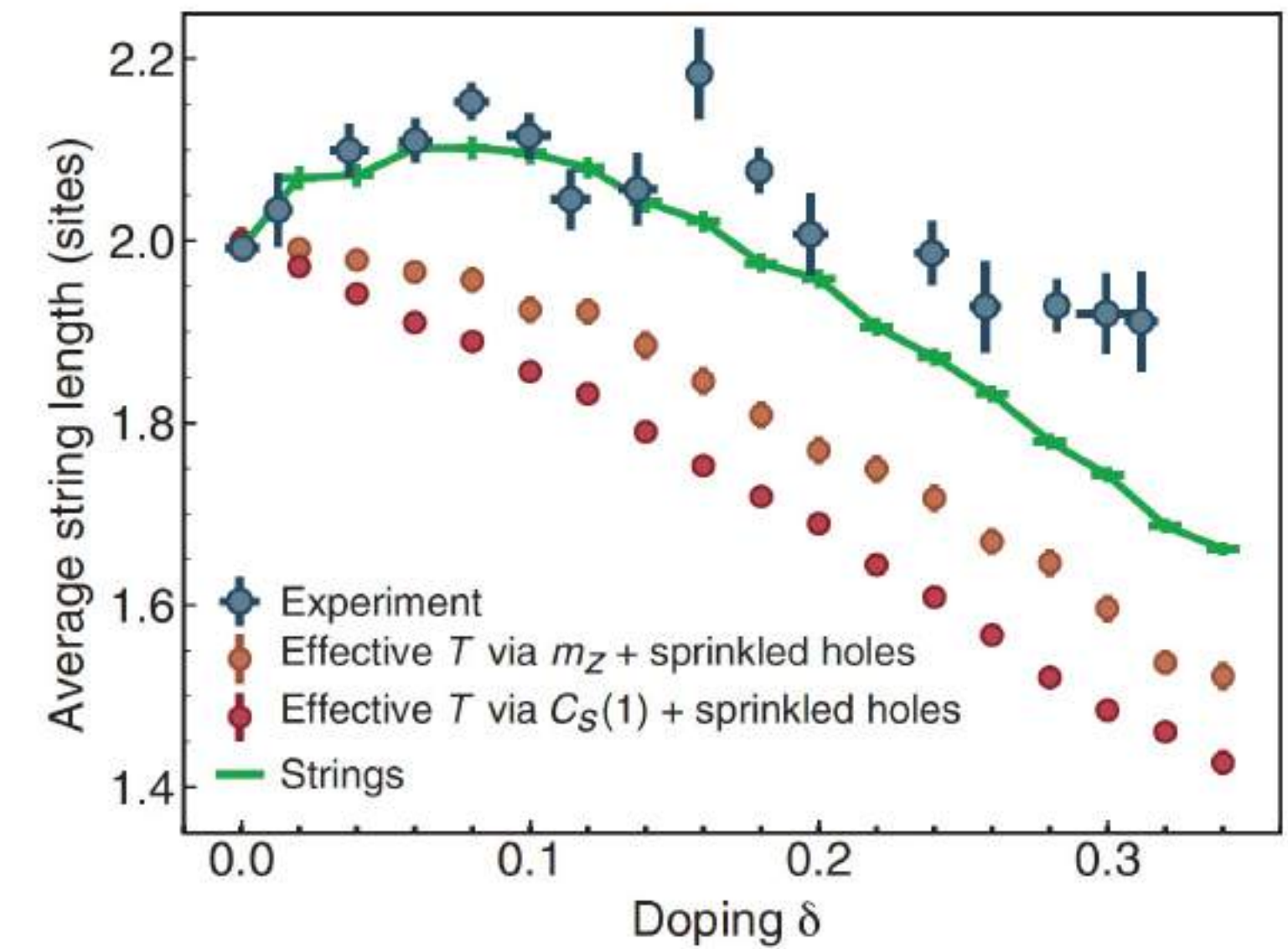
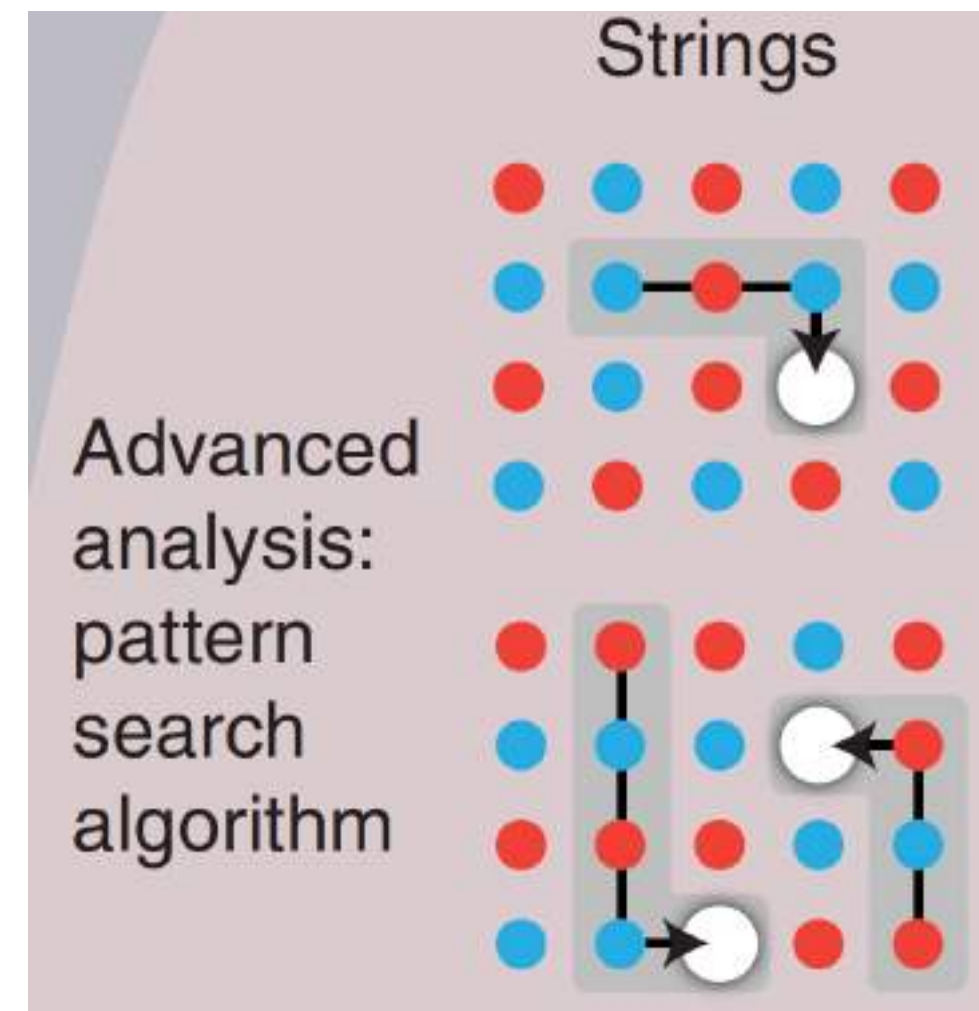
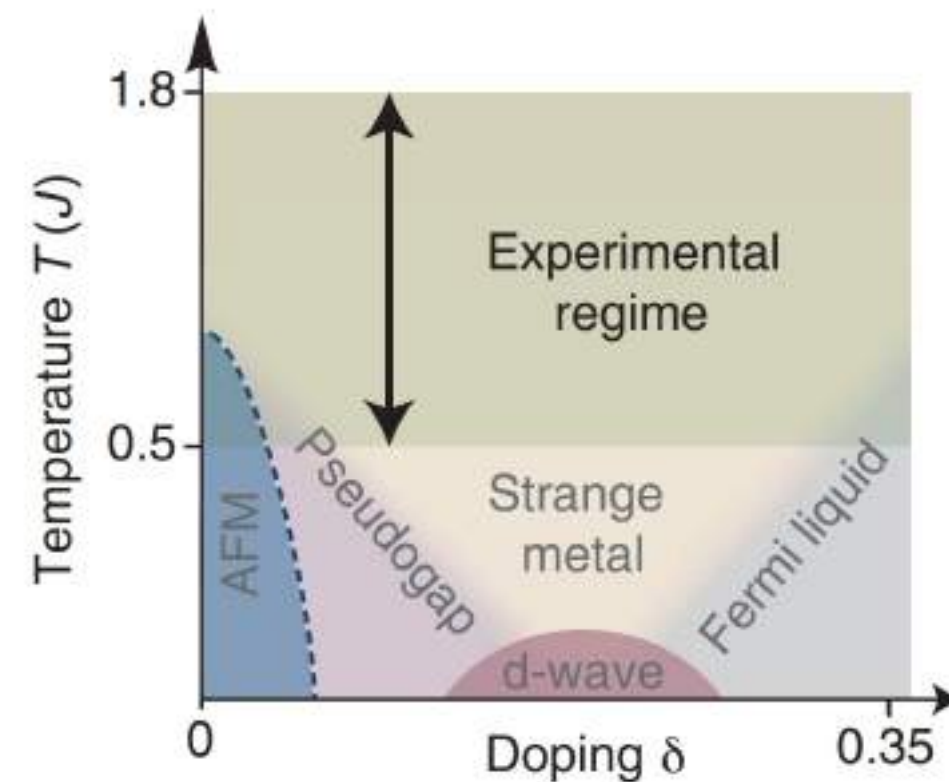
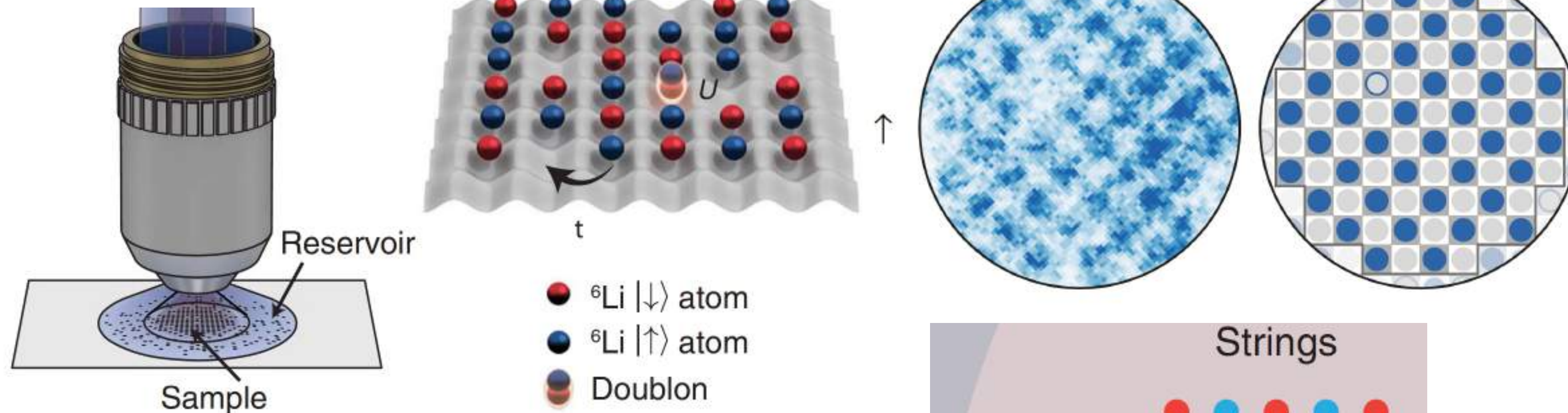
- 2つのquarkからなる複合粒子としてmesonを記述.
- quark間にはゲージ場が働き, 束縛状態を作る (quarkの閉じ込め) .

強相関電子系におけるストリング励起の最近の話題

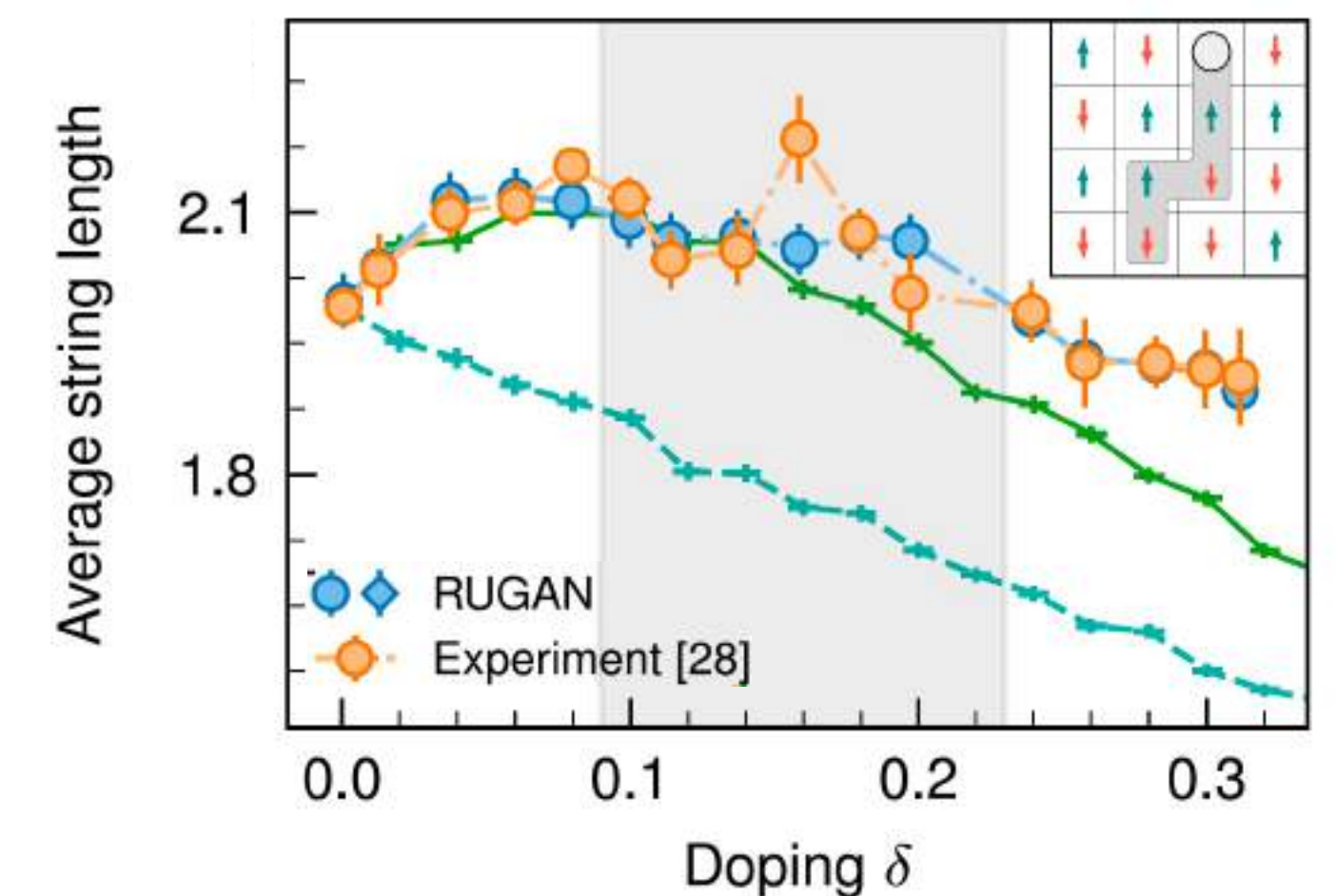
String patterns in the doped Hubbard model Science 365, 251 (2019)

Christie S. Chiu¹, Geoffrey Ji¹, Annabelle Bohrdt^{2,1,3}, Muqing Xu¹, Michael Knap^{2,3}, Eugene Demler¹, Fabian Grusdt^{1,3}, Markus Greiner^{1*}, Daniel Greif¹

量子気体顕微鏡



Generative Adversarial Networks (GAN)



C. Casert, *et al.*, arXiv:2002.07055

強相関電子系におけるストリング励起の最近の話題

PHYSICAL REVIEW X **8**, 011046 (2018)

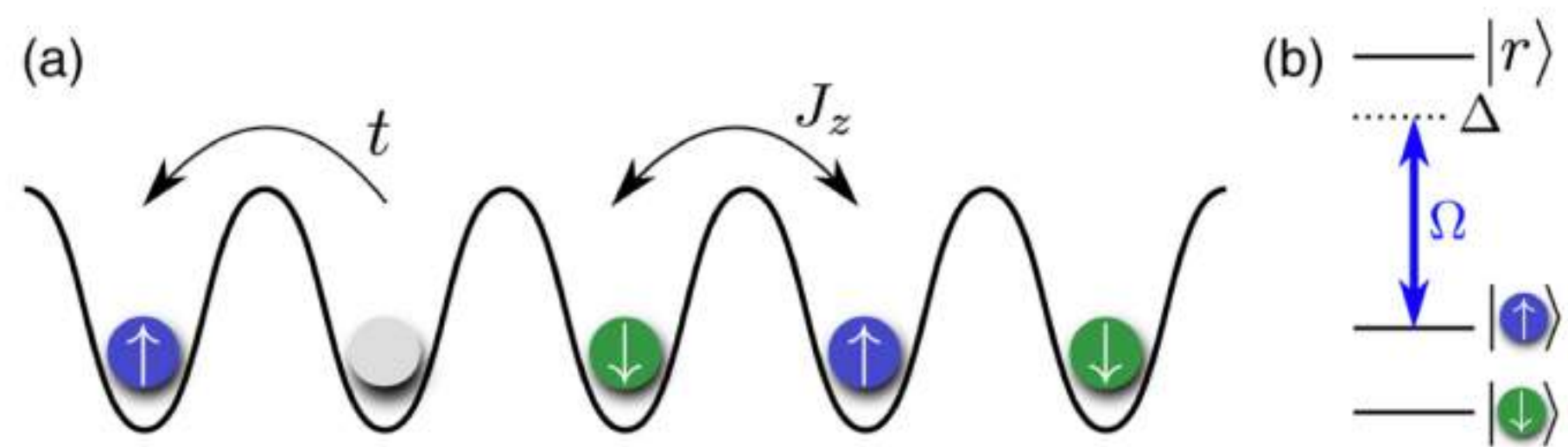
Parton Theory of Magnetic Polarons: Mesonic Resonances and Signatures in Dynamics

F. Grusdt,¹ M. Kánasz-Nagy,¹ A. Bohrdt,^{2,1} C. S. Chiu,¹ G. Ji,¹ M. Greiner,¹ D. Greif,¹ and E. Demler¹

¹Department of Physics, Harvard University, Cambridge, Massachusetts 02138, USA

²Department of Physics and Institute for Advanced Study,
Technical University of Munich, 85748 Garching, Germany

Rydberg原子などを用いた, t - J_z 模型の実現



$$\mathcal{H}^{t-J_z} = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + J_z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$$
$$J_z \propto \frac{\hbar \Omega^4}{8|\Delta|^3}$$

Ω : The Rabi frequency
 Δ : detuning

- t - J_z 模型に関しては膨大な理論研究があるが, トイモデルだと考えられてきた.
- t - J 模型と t - J_z 模型では, ストリング励起の性質の性質が大きく異なる.
--> ストリング励起の性質の理解が進むと期待されている.

Outline

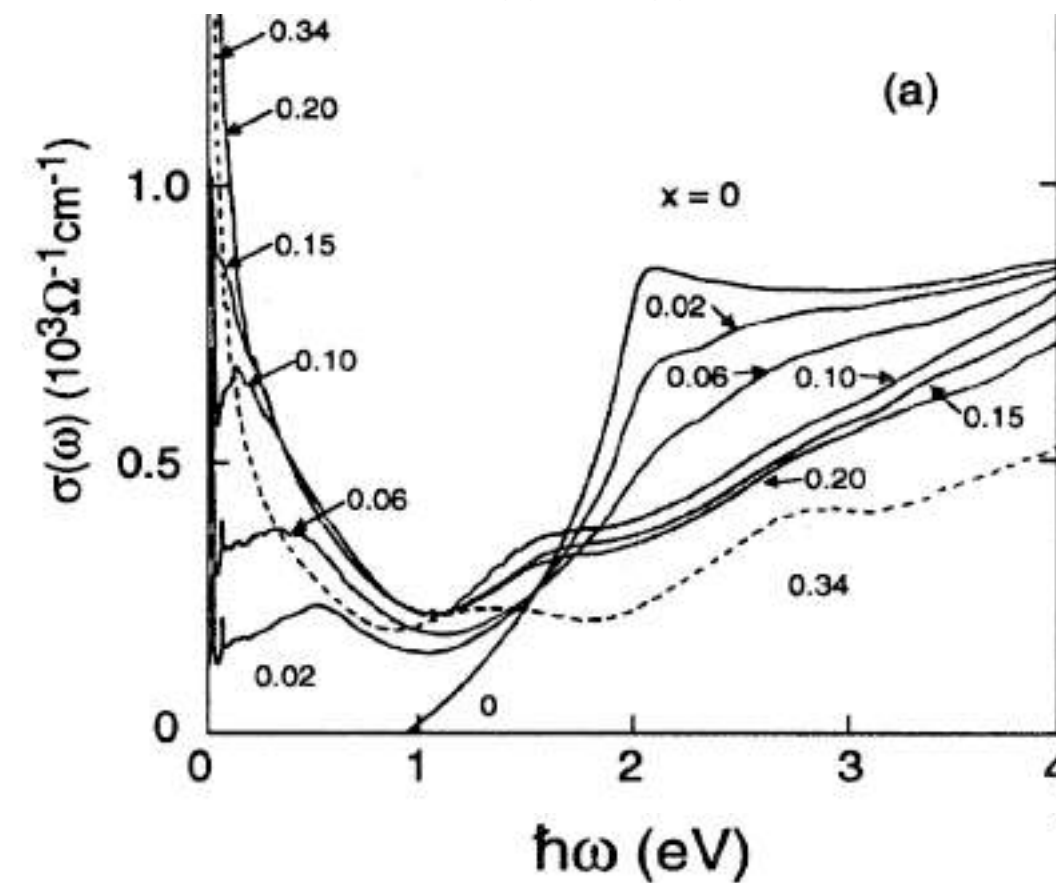
- Introduction
 - String excitations in strongly correlated electron systems
 - Mid-infrared weights of optical spectrum
 - Phase strings
- Motivation and purpose
- Results
 - Optical conductivity
 - Single-particle spectral function
- Summary

Midinfrared weights of $\text{Re}\sigma(\omega)$ for hole doped Mott insulators

Experiment

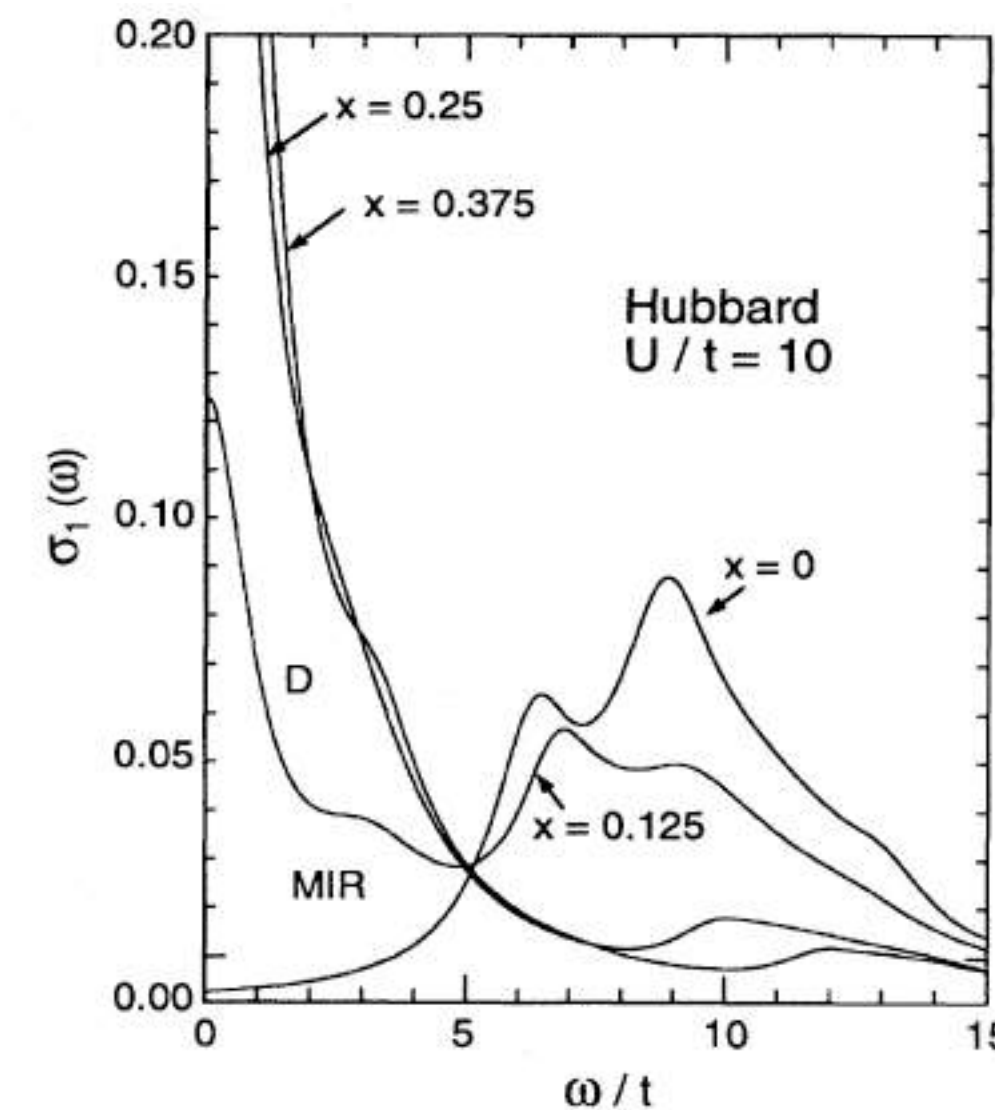
Theory

Two-dimensional system:



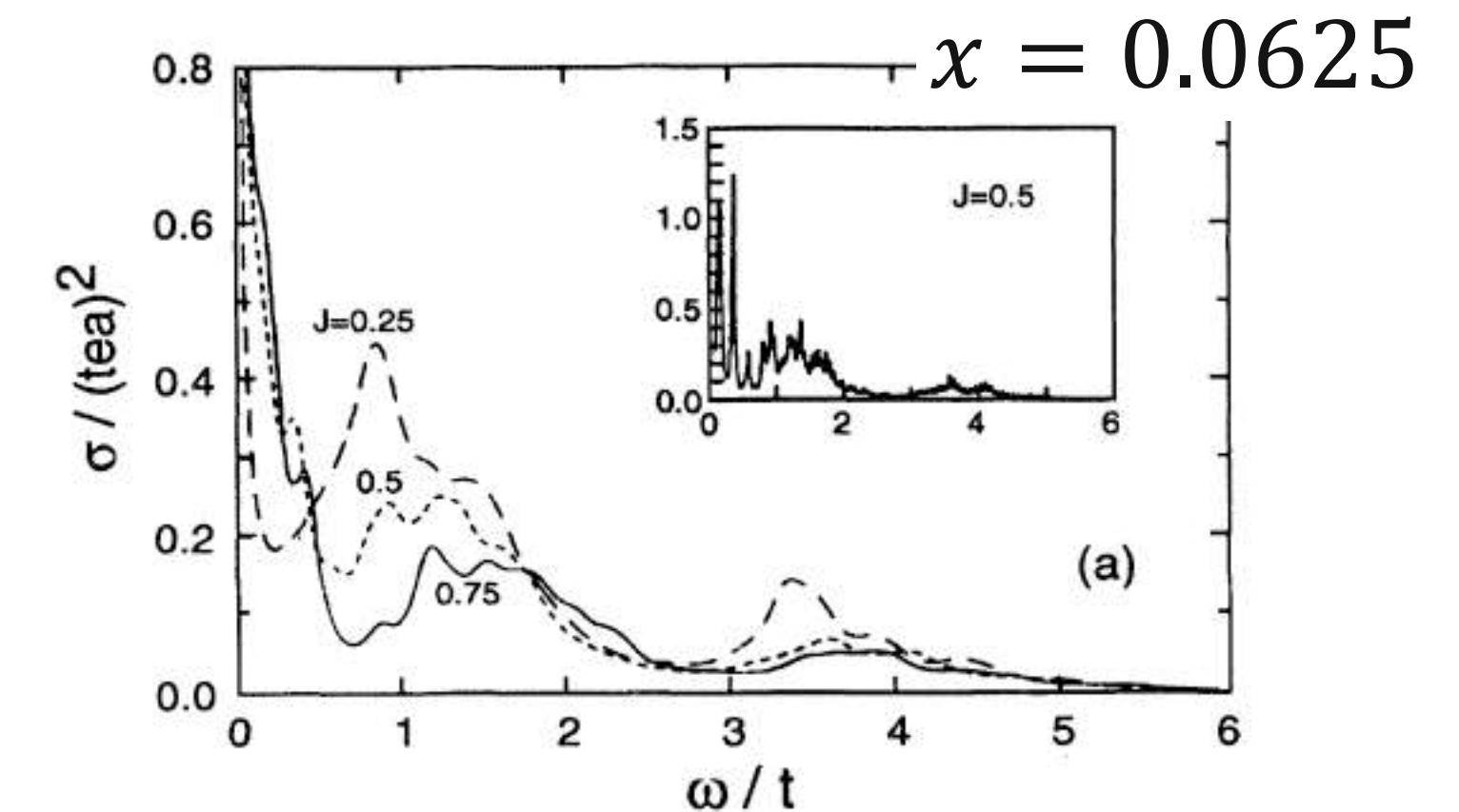
Uchida, *et al.*, PRB **43** 7942 (1991)

4x4 Hubbard Model



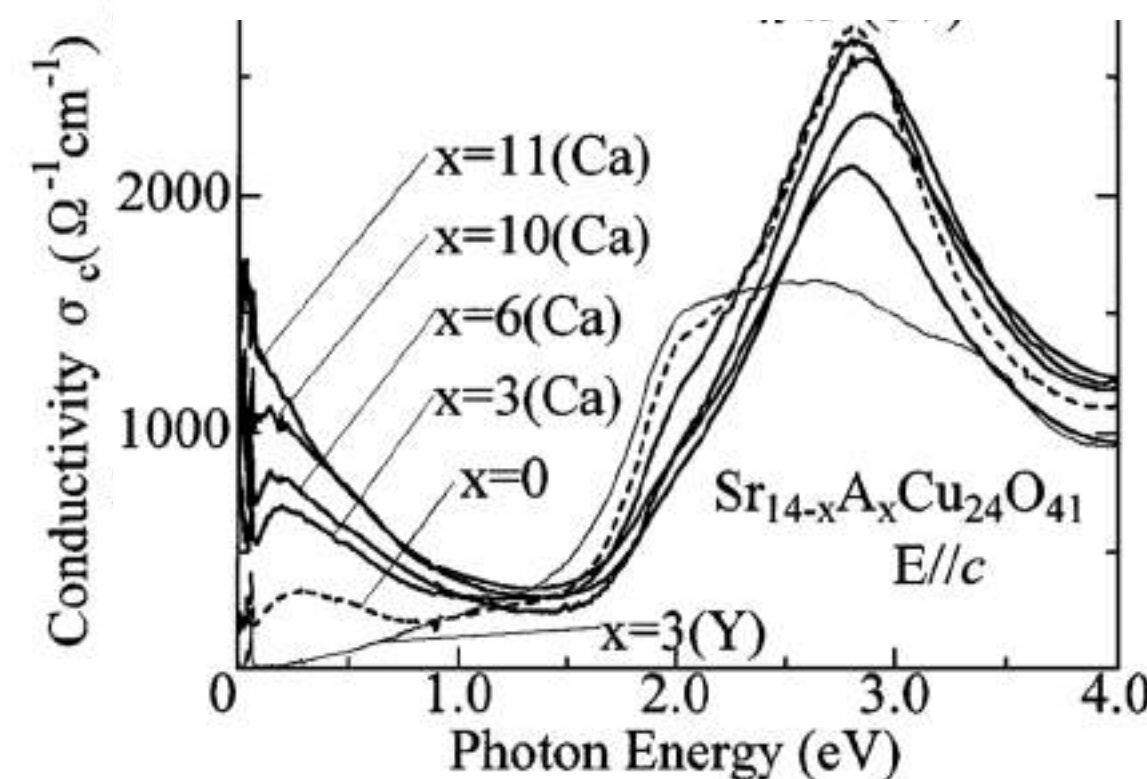
E. Dagotto, *et. al*, PRB **45**, 10107 (1992)

4x4 $t - J$ Model



W. Stephan and P. Horsch, PRB **42**, 8736 (1990)

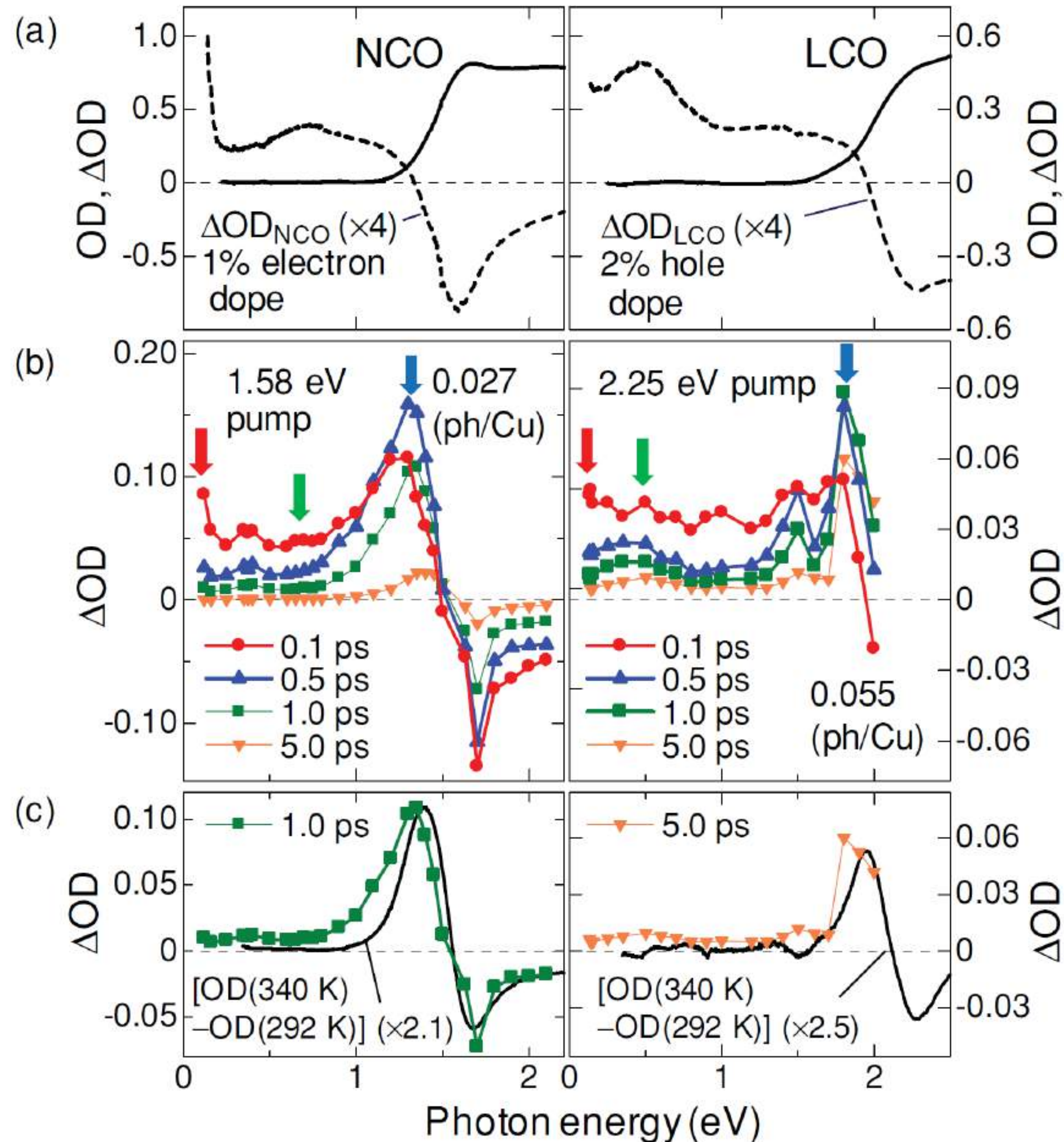
Two-leg ladder: $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$



T. Osafune, *et al.*, PRL **78**, 1980 (1997)

- Upon doping, spectral weights appear at mid-infrared (**MIR**).
- Incoherent MIR weights are caused by the coupling between spin and charge, i.e., **string** excitations.

Midinfrared weights of $\text{Re}\sigma(\omega, t)$ for photodoped Mott insulators

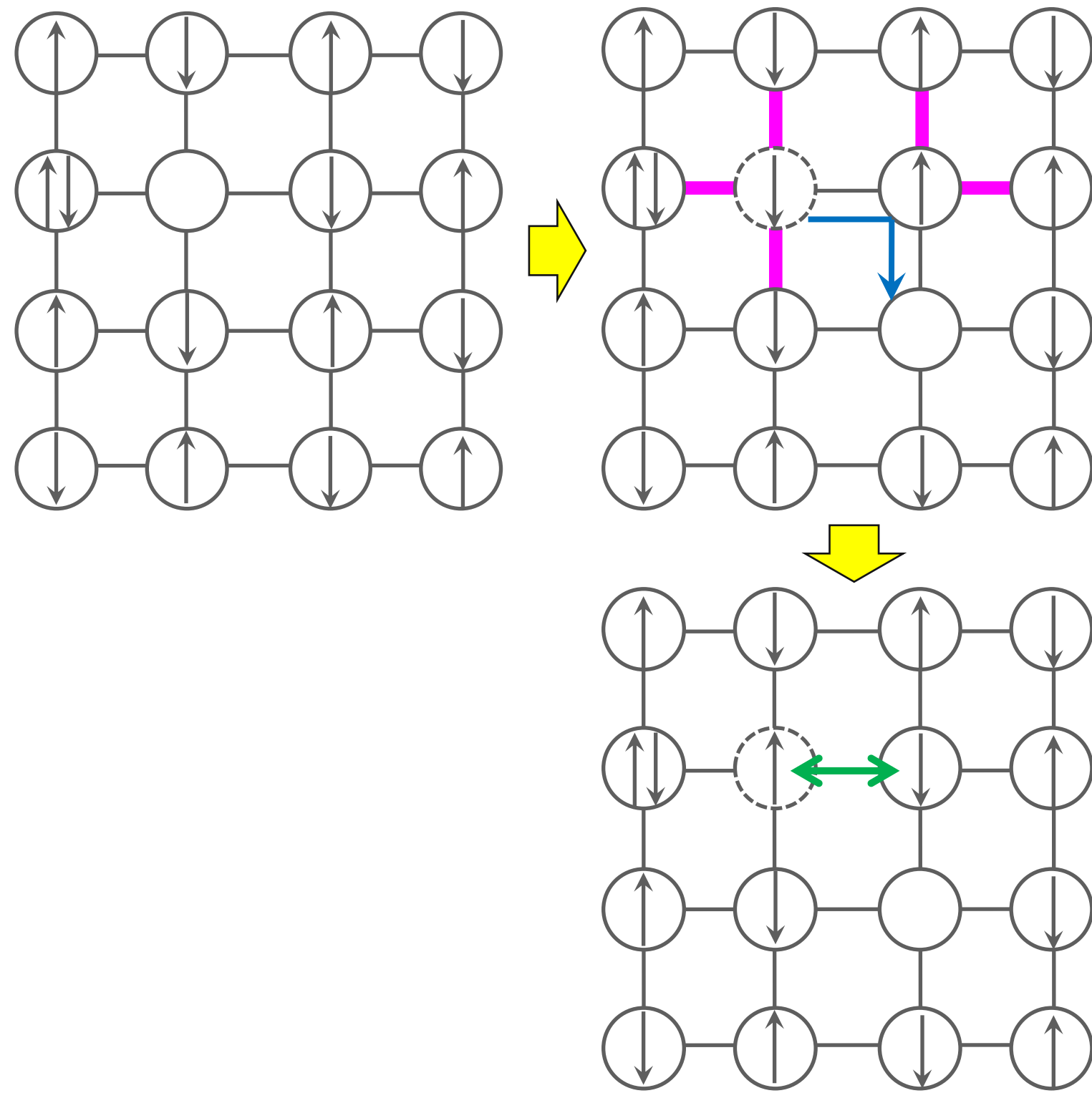


- Upon photodoping, spectral weights appear at MIR.

String excitation

We focus on the Mott Insulator with a single hole.

Strings picture



Strings are classified in two categories.

① S^z strings

- S^z strings are generated by J_z , which bound a hole to their original position by a linear potential proportional to $J_z^{2/3}$.
- S^z strings are **relaxed/repairable** by quantum spin flips once $J_\perp$ is introduced.

S. Schmitt-Rink, *et al.*, PRL **60**, 2793 (1988)

C. Kane, *et al.*, PRB **39**, 6880 (1990)

G. Martinez and P. Horsch, PRB **44**, 317 (1991)

A hole becomes a mobile object, which carries a local spin distortion called **spin polaron**.

A hole moves in an AFM state.

→ miss-arranged spins with respect to their sublattice

→ string-type excitation of spins

Phase strings

ストリング励起にはもう一つ（横成分が）ある.

→ $s^\pm$ strings / phase strings

phase stringとは

- モット絶縁体中の電荷自由度とスピン自由度の間に働く力を微視的に記述する上では考慮に入れるべき効果
- bipartiteなハーフフィリングのハバード模型, i.e., ハイゼンベルク模型の基底状態において厳密に成り立つ **Marshall sign rule** を出発点にし, ホールドープにより生じる Marshall sign の乱れとして現れる効果
- 反強磁性スピンのバックグラウンド内をホールが運動するときに獲得されるベリー位相の効果

Outline

- Introduction
 - String excitations in strongly correlated electron systems
 - Mid-infrared weights of optical spectrum
 - Phase strings
- Motivation and purpose
- Results
 - Optical conductivity
 - Single-particle spectral function
- Summary

Marshall sign rule(1)

W. Marshall, Proc. R. Soc. London Ser. **A232**, 48 (1955)

Marshall sign rule : bipartiteな格子上の反強磁性ハイゼンベルク模型の基底状態の係数を, 全て正に取ることができるという法則

ハイゼンベルク模型

$$\mathcal{H}^J = \mathcal{H}^{J\perp} + \mathcal{H}^{J_z}$$

$$\mathcal{H}^{J\perp} = \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-)$$

$$\mathcal{H}^{J_z} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$$

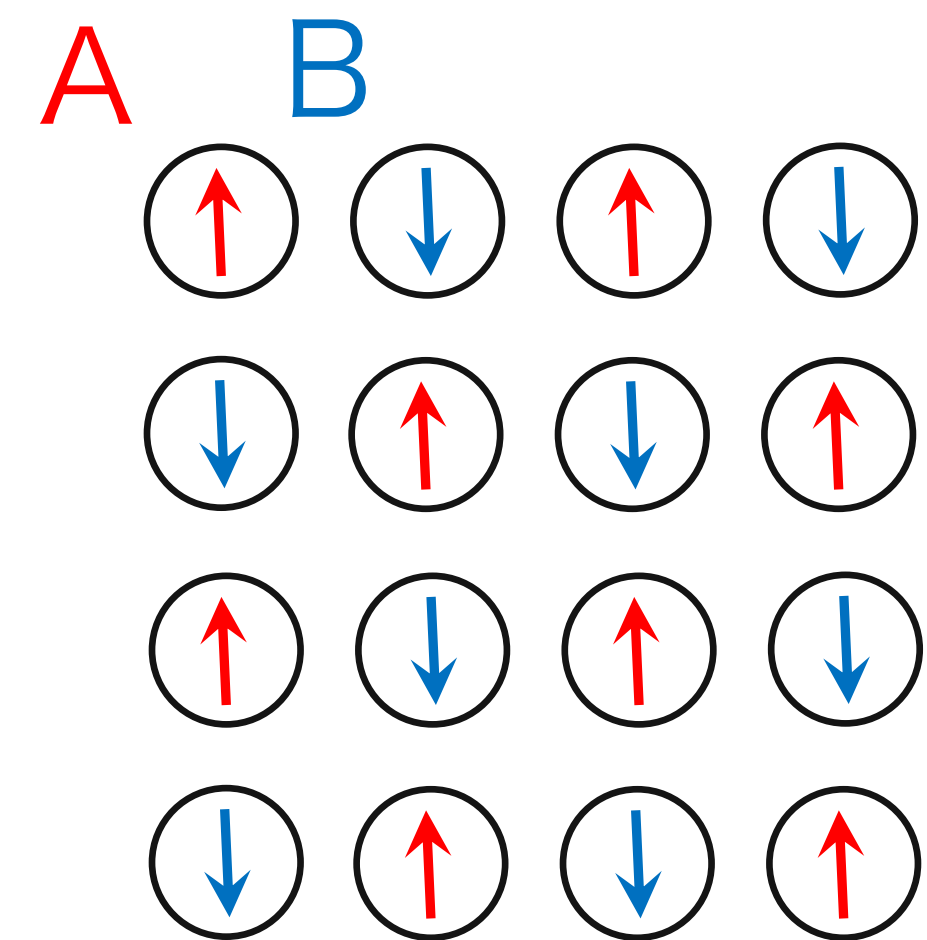
ハイゼンベルク模型はtotal S^z と可換.

→ ハーフ・フィリングの場合は $\sum_i S_i^z = 0$ を満たす部分空間のみを考えれば良い.

この部分空間を構成する基底は以下のようなイジング基底で表せる.

$$|\mu\rangle = |\uparrow \cdots \downarrow \uparrow \cdots \downarrow\rangle$$

bipartite格子は2つの副格子に分けることができ, それぞれA, Bと名付ける.



Marshall sign rule(2)

W. Marshall, Proc. R. Soc. London Ser. **A232**, 48 (1955)

次のような基底の変換を行う.

$$|\phi\rangle = (-1)^{N_A^\downarrow(\mu)} |\mu\rangle$$

$N_A^\downarrow(\mu)$: $|\mu\rangle$ のスピンの配置において, 副格子Aにある $\downarrow$ スピンの総数

この変換に対し, $\mathcal{H}^{J_z}$ は影響を受けない.
また, $|\phi\rangle$ 基底でも $|\mu\rangle$ 基底でも対角化されている.

$$\begin{aligned}\langle\phi'|\mathcal{H}^{J_z}|\phi\rangle &= J \sum_{\langle i,j\rangle} \langle\phi'|S_i^z S_j^z|\phi\rangle \\ &= J \sum_{\langle i,j\rangle} \langle\mu|S_i^z S_j^z|\mu\rangle\end{aligned}$$

Marshall sign rule(3)

W. Marshall, Proc. R. Soc. London Ser. **A232**, 48 (1955)

$\mathcal{H}^{J\perp}$ に関しては非対角成分を持ち，変換された基底に対し0以下の行列要素を与える．

$$\begin{aligned}\langle\phi'|\mathcal{H}^{J\perp}|\phi\rangle &= \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j\rangle} \langle\phi'| (S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-) |\phi\rangle \\ &= \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j\rangle} \langle\mu'| (-1)^{N_A^\downarrow(\mu')} (S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-) (-1)^{N_A^\downarrow(\mu)} |\mu\rangle \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j\rangle} \langle\mu'| (S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-) |\mu\rangle \leq 0\end{aligned}$$

スピンの交換
↙

∵ $N_A^\downarrow(\mu') = N_A^\downarrow(\mu) \pm 1$

この基底では $\mathcal{H}^{J\perp}$ の非対角行列要素を0または負の値に取ることができる．

対角行列要素に関しては，エネルギーの基準を適当に負の方にずらせばよく，結局全ての行列要素を0または負の値に取ることができる．

このような基底では（ペロン・フロベニウスの定理より），ハミルトニアン $\mathcal{H}^J$ の最小固有値の固有ベクトルの全ての要素を正に取ることができる．

Marshall sign rule(4)

W. Marshall, Proc. R. Soc. London Ser. **A232**, 48 (1955)

bipartite格子のハイゼンベルク模型の基底状態は、基底をうまく選べば

$$|\Phi\rangle = \sum_{\phi} c_{\phi} |\phi\rangle \quad c_{\phi} \geq 0$$

のように書くことができる。元のイジング基底 $|\mu\rangle$ で表現し直すと

$$|\Phi\rangle = \sum_{\mu} (-1)^{N_{\text{A}}^{\downarrow}} c_{\mu} |\mu\rangle \quad c_{\mu} \geq 0$$

と書くことができ、波動関数の符号は全て $(-1)^{N_{\text{A}}^{\downarrow}}$ に押し付けられている。

$|\phi\rangle$ はMarshall signを組み込んだ基底なのでMarshall基底と呼ぶ。

Marshall sign ruleを満たす基底状態では $\uparrow\downarrow \rightarrow (-1) \downarrow\uparrow$ のような符号の変化が伴わなければならない。

Marshall基底での電子のホッピングの効果

クーロン相互作用が大きいモット絶縁体中にホールを1つドープした場合を考える.

i.e., 1ホールドープした t - J 模型を考える.

D. N. Sheng, *et al.*, PRL **77**, 5102 (1996)
Z.-Y. Weng, *et al.*, PRB **55**, 3894 (1997)

$$\mathcal{H}^{t-J} = \mathcal{H}^T + \mathcal{H}^J$$

$$\mathcal{H}^T = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma})$$

Marshall基底では $\mathcal{H}^T$ の行列要素は

$$\langle \phi; (m) | \mathcal{H}^T | \phi; (n) \rangle = -t_h \sigma_m$$

$|\phi; (n)\rangle$: サイト n にホールがある時の基底
サイト m にあるスピンの位置にホッピングする過程の行列要素

↑

→

↑

$\sigma_m = +1$

↓

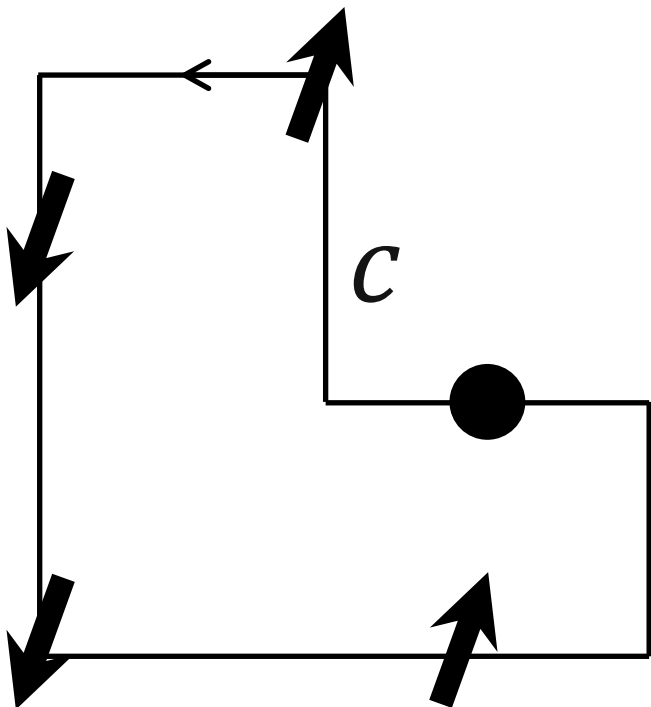
→

↓

$\sigma_m = -1$

↓スピンのホッピングは (-1) の符号を伴う.

パス c 上でホールが運動することにより生まれる符号
--> phase string



$$\prod_c \sigma_m = (+1) \times (-1) \times \cdots \times (-1) := (-1)^{N_c^\downarrow}$$

$N_c^\downarrow$: パス c 上で↓スピンの位置がホールと交換する回数

t - J 模型に現れるphase stringの効果

スレーブフェルミオン描像

$$c_{i,\sigma} = f_i^\dagger b_{i,\sigma} \qquad f_i^\dagger f_i + \sum_{\sigma} b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} = 1$$

において, Marshall signを導入し, 改めてスピノン演算子を定義し直すと,

$$c_{i,\sigma} = f_i^\dagger b_{i,\sigma} (-\sigma)^i$$

これを用いると t - J 模型 $\mathcal{H}^{t-J} = \mathcal{H}^T + \mathcal{H}^J$ は以下のようにかける.

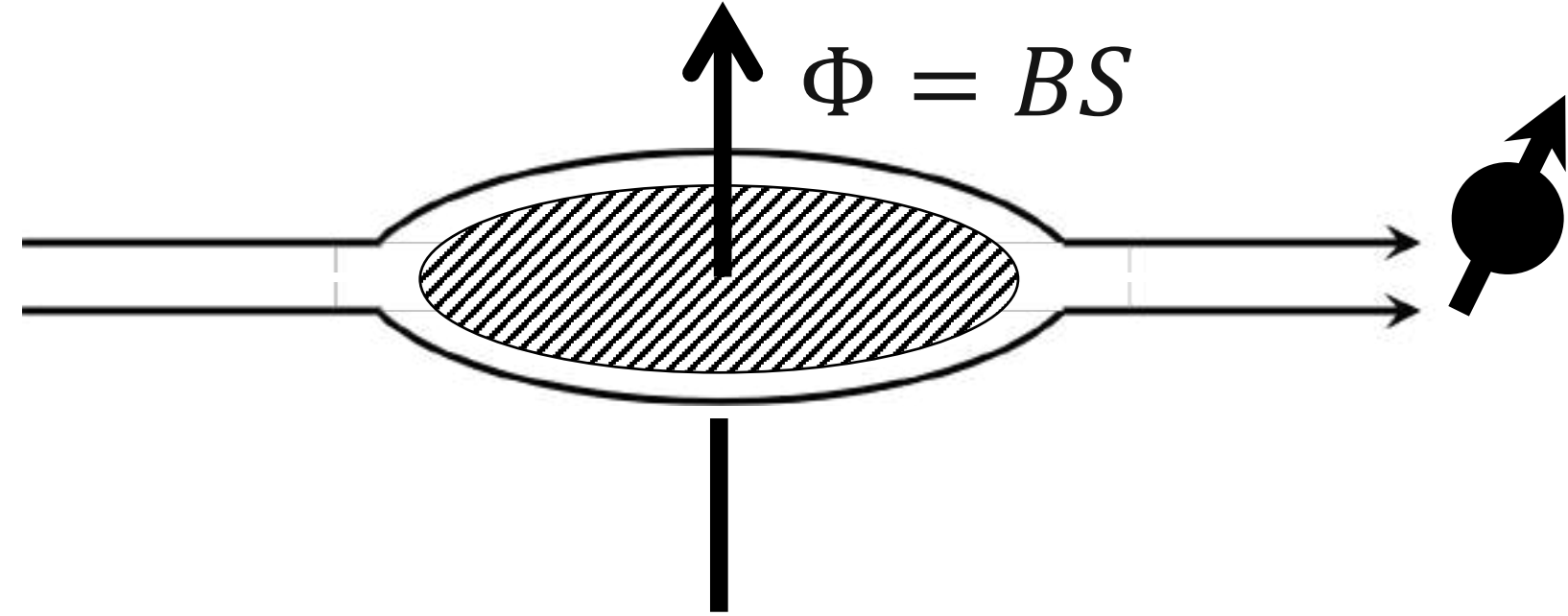
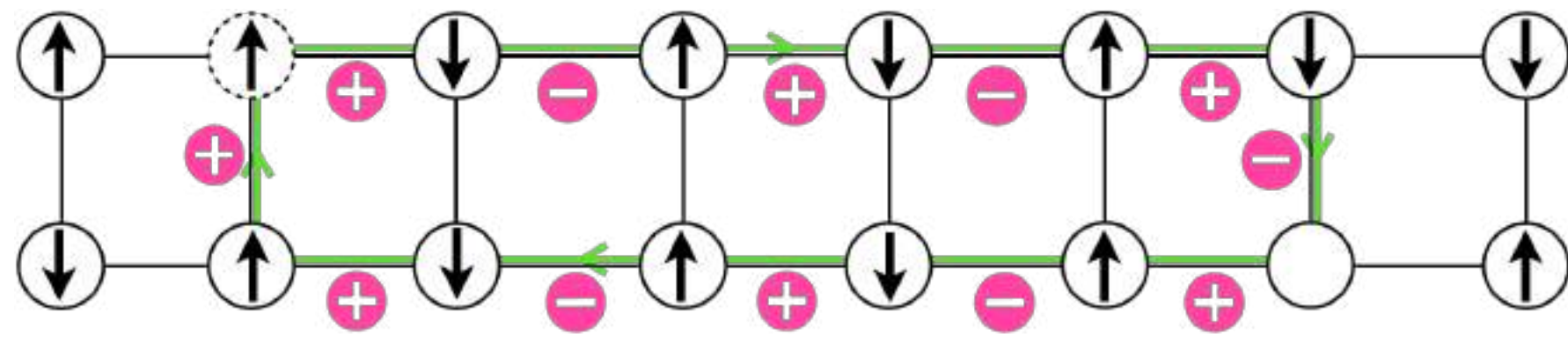
$$\mathcal{H}^J = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle, \sigma, \sigma'} b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,-\sigma}^\dagger b_{j,-\sigma'} b_{i,\sigma'}$$

Marshall signをあらかじめ考慮したので, 全ての行列要素 $\langle \phi' | \mathcal{H}^J | \phi \rangle \leq 0$ を0または負にできる.

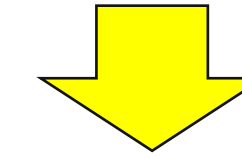
$$\mathcal{H}^T = -t_h \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\sigma) f_i^\dagger f_j b_{j,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + \text{H.c.}$$

(σ) の因子の部分がphase stringによって生み出される符号であり, phase stringの効果 $\mathcal{H}^T$ に押し付けられている.

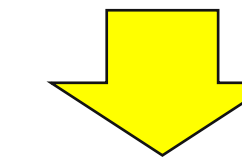
phase stringの生み出すベリー位相



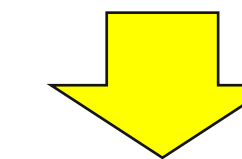
ホールの導入によるMarshall sign ruleの乱れ



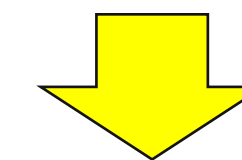
ホールのホッピングにより，符号の列 $(\pm 1) \times \cdots \times (\pm 1)$ がパスの跡に残される．



ループパス c に沿って， $(-1)^{N_c^\downarrow}$ の位相が現れ，スピン配置とパスに依存した一般化したベリー位相による量子干渉が発生．



phase stringが生み出すベリー位相が，ホールドーピングに対するモット絶縁体の特異性を生み出す．



“unrenormalizable many-body phase shift”

P. W. Anderson, PRL 64, 1839 (1990).

Z. Y. Weng, *et al.*, PRB 61, 12328 (2000).

many-body phase shift

phase stringの効果により生み出されるベリー一位相をexplicitに組み込んだ基底 $|\bar{\phi}\rangle$ への変換を行う.

$|\bar{\phi}\rangle = e^{i\hat{\Theta}}|\phi\rangle$
: many-body phase shift

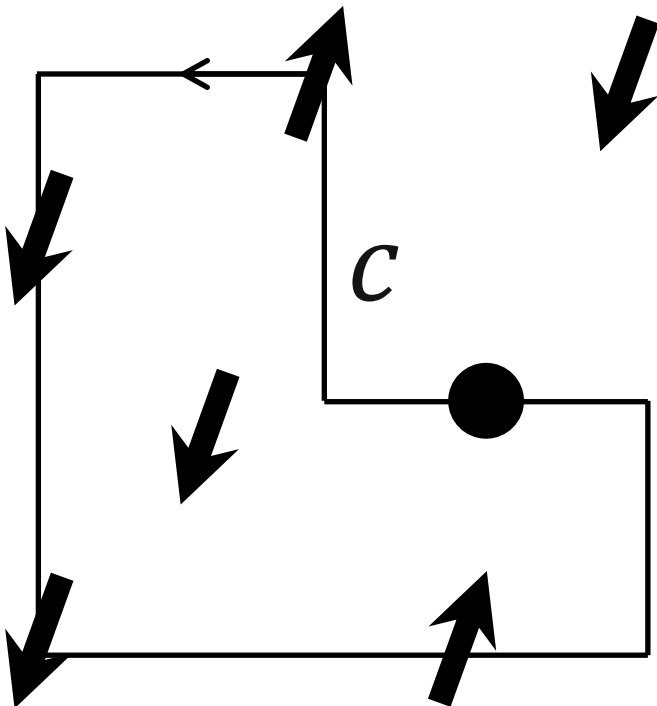
$$e^{i\hat{\Theta}} = \prod_{i,l} e^{-in_i^h \theta_i(l) n_{l,\downarrow}^b}$$

$$= e^{-i \sum_{i,l} n_i^h \theta_i(l) n_{l,\downarrow}^b}$$

$$\theta_i(l) = \text{Im} \ln(z_i - z_l)$$

$$z = x + iy$$

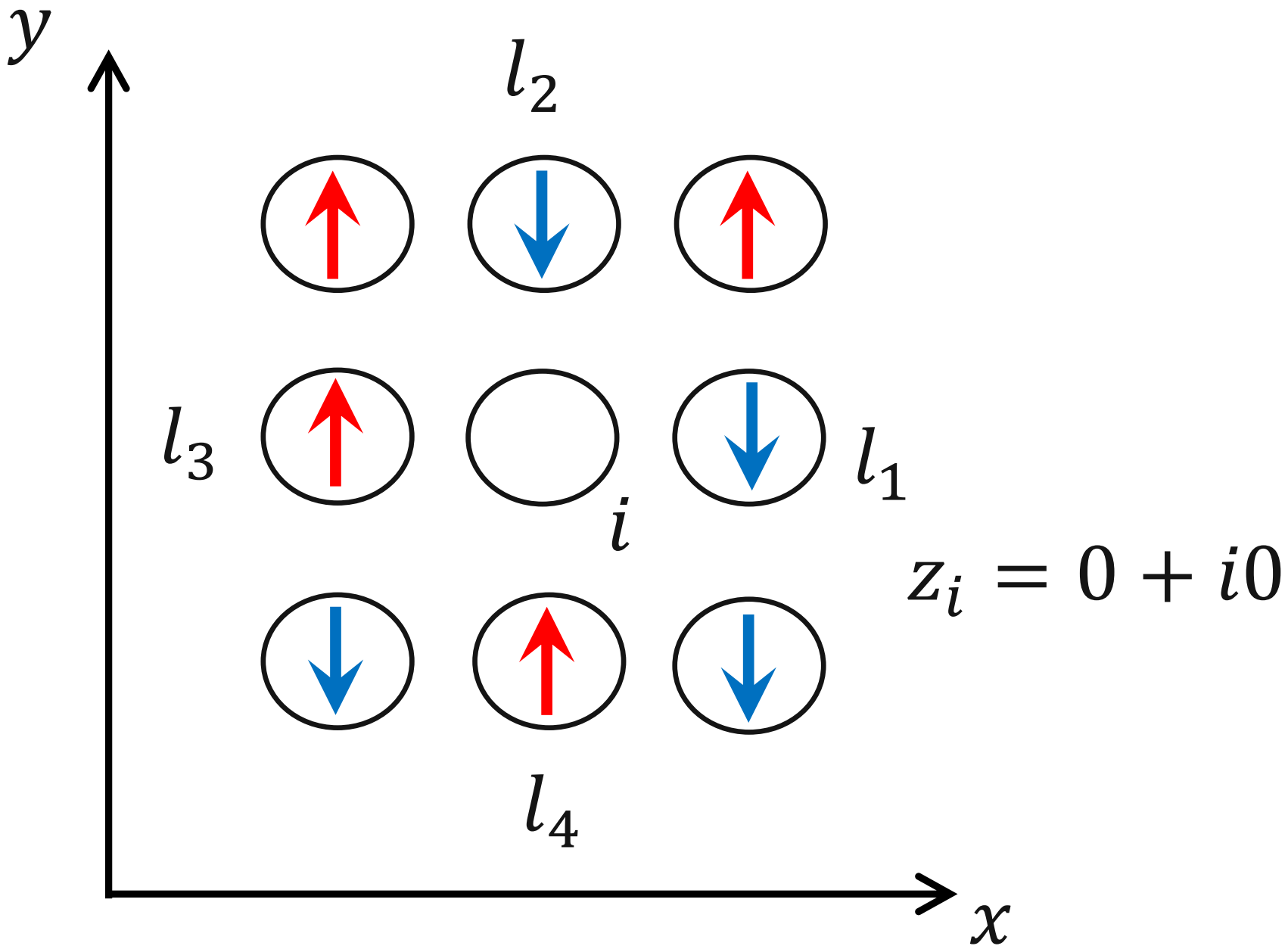
$e^{i\hat{\Theta}}$ はphase stringにより生み出されるベリー一位相をexplicitに組み込むための演算子



$$e^{i\Theta} \rightarrow (-1)^{N_C^\downarrow} \times e^{i\Theta}$$

$$\therefore \begin{cases} \downarrow \text{ spin inside path C: } e^{\pm i2\pi} = 1 \\ \downarrow \text{ spin outside path C: } e^{i0} = 1 \end{cases}$$

z_l	$\theta_i(l)$ (Before)	$\theta_i(l)$ (After)	$\theta_i(l)$ (difference)
$z_{l_1} = 1 + i0$	$-\pi$	0	π
$z_{l_1} = 0 + i$	$-\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$	π
$z_{l_1} = -1 + i0$	0	0	0
$z_{l_1} = 0 - i$	0	0	0



phase stringの生み出す非局所的なゲージ場

Z.-Y. Weng, *et al.*, PRB 55, 3894 (1997)

phase stringにより生じるベリー一位相を組み込むために基底の変換 $c_{i,\sigma} \rightarrow e^{i\hat{\Theta}} c_{i,\sigma} e^{-i\hat{\Theta}}$ を行くと

$$c_{i,\sigma} = h_i^\dagger b_{i,\sigma} e^{i\hat{\Theta}_{i,\sigma}^{\text{string}}} \quad \left[h_i^\dagger = f_i^\dagger e^{-i \sum_{l \neq i} \theta_i(l) n_l^h} : \text{Jordan-Wigner変換} \right]$$

となる. ここで, ホロンとスピノンの分解には以下の非局所的な位相因子が導入されている.

$$e^{i\hat{\Theta}_{i,\sigma}^{\text{string}}} := (-\sigma)^i e^{\frac{i}{2} [\Phi_i^s - \Phi_i^0 - \sigma \Phi_i^h]} \quad \Phi_i^s = \sum_{l \neq i} \theta_i(l) (n_{l,\uparrow}^b - n_{l,\downarrow}^b) \quad \Phi_i^0 = \sum_{l \neq i} \theta_i(l) \quad \Phi_i^h = \sum_{l \neq i} \theta_i(l) n_l^h$$

これを用いると t - J 模型 $\mathcal{H}^{t-J} = \mathcal{H}^T + \mathcal{H}^J$ は以下のようにかける.

$$\mathcal{H}^T = -t_h \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (e^{iA_{ij}^s - i\phi_{ij}^0}) h_i^\dagger h_j (e^{i\sigma A_{ji}^h}) b_{j,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + \text{H.c.}$$

$$\mathcal{H}^J = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle, \sigma, \sigma'} (e^{i\sigma A_{ij}^h}) b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,-\sigma}^\dagger (e^{i\sigma' A_{ji}^h}) b_{j,-\sigma'} b_{i,\sigma'}$$

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

$$A_{ij}^h := \frac{1}{2} \sum_{l \neq i,j} [\theta_i(l) - \theta_j(l)] n_l^h$$

$$\phi_{ij}^0 := \frac{1}{2} \sum_{l \neq i,j} [\theta_i(l) - \theta_j(l)]$$

- $h_i^\dagger$ も $b_{i,\sigma}$ もボソンなので非自明な位相はゲージ場 A^s , A^h から現れる.
- この表示では符号の因子(σ)が”gauge away”されるが, その”代償”として非局所的なゲージ場が現れる.

phase stringの生み出す非局所的なゲージ場

ゲージ場 A^s , A^h は以下のような拘束条件を満たさなければならない.

$$\sum_c A_{ij}^s = \pi \sum_{l \in c} (n_{l,\uparrow}^b - n_{l,\downarrow}^b)$$

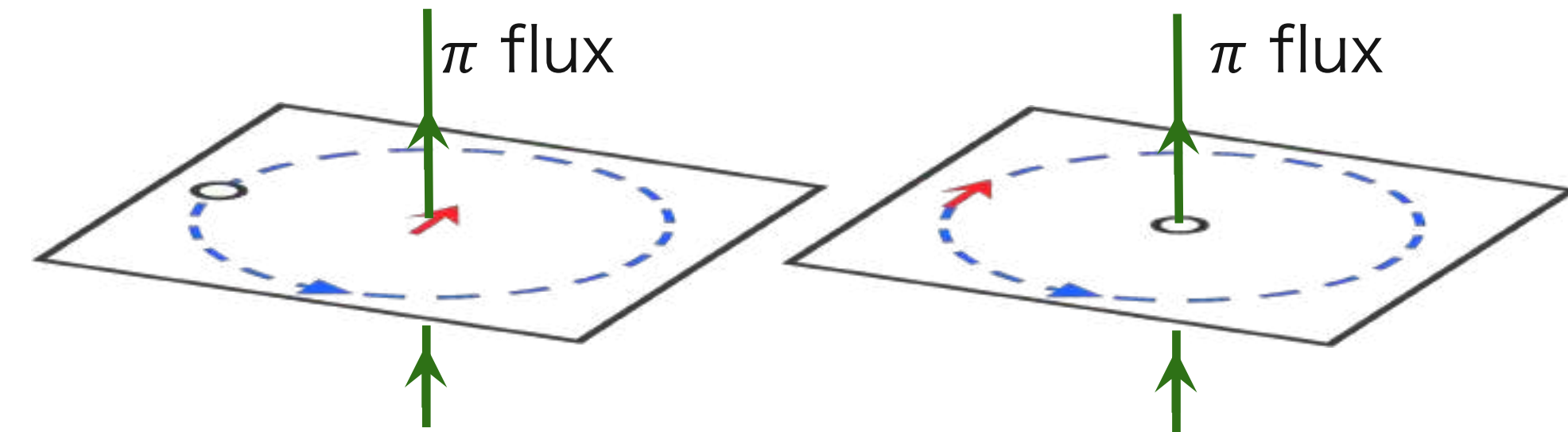
$$\sum_c A_{ij}^h = \pi \sum_{l \in c} n_l^h$$

$\sum_c A_{ij}^s$ や $\sum_c A_{ij}^h$ はループ c 内部のスピノンとホロンの数で決まり, それぞれスピノンとホロンに付着した π 磁束量子と見なせる.

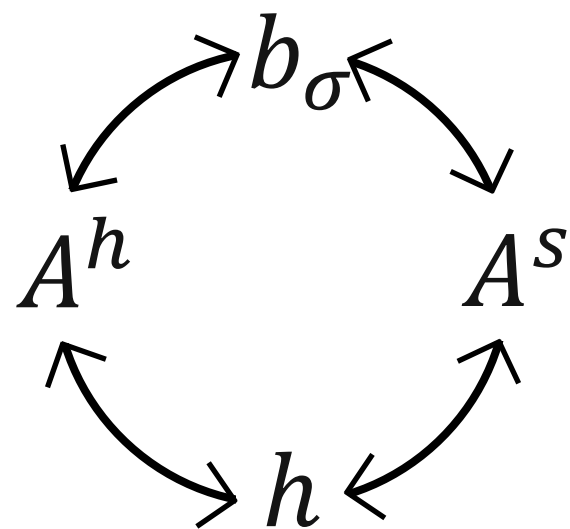
スピノン (ホロン) に付着した磁束量子は $\mathcal{H}^T(\mathcal{H}^J)$ においてホロン (スピノン) と結合する.

$$\mathcal{H}^T = -t_h \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (e^{iA_{ij}^s - i\phi_{ij}^0}) h_i^\dagger h_j (e^{i\sigma A_{ji}^h}) b_{j,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + \text{H.c.}$$

$$\mathcal{H}^J = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle, \sigma, \sigma'} (e^{i\sigma A_{ij}^h}) b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,-\sigma}^\dagger (e^{i\sigma' A_{ji}^h}) b_{j,-\sigma'} b_{i,\sigma'}$$



A^s と A^h は互いに独立ではなく, mutual Chern-Simonsゲージ場がホロンとスピノンの間に働く.



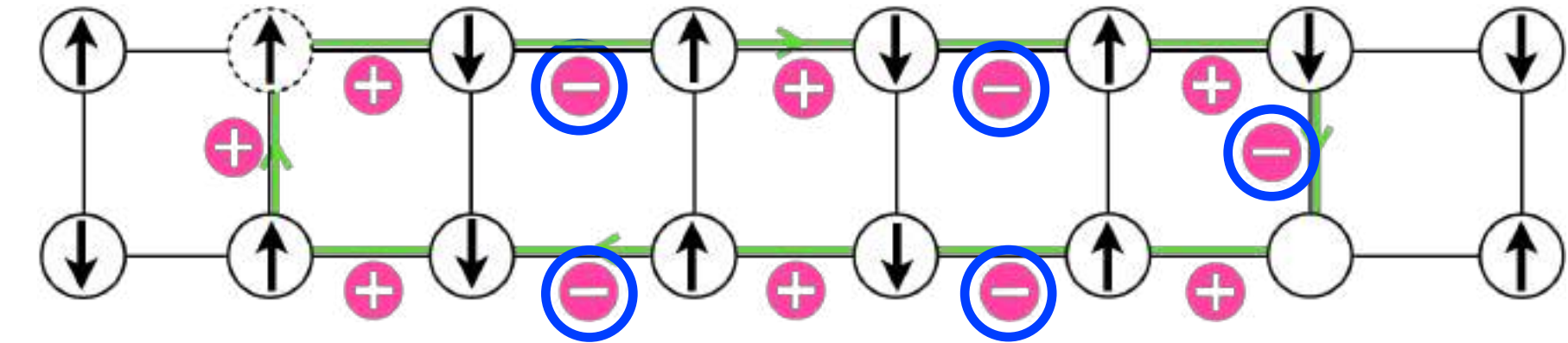
Phase strings

② $S^\pm$ strings / phase strings (PS)

- Irreparable by quantum spin flips
- Nonlocal quantum interference
- Responsible for an intrinsic self-localization of the injected hole in two dimensions.

D. N. Sheng, *et al.*, PRL **77**, 5102 (1996)

Z. Zhu, *et al.*, Sci. Rep. **3**, 2586 (2013)

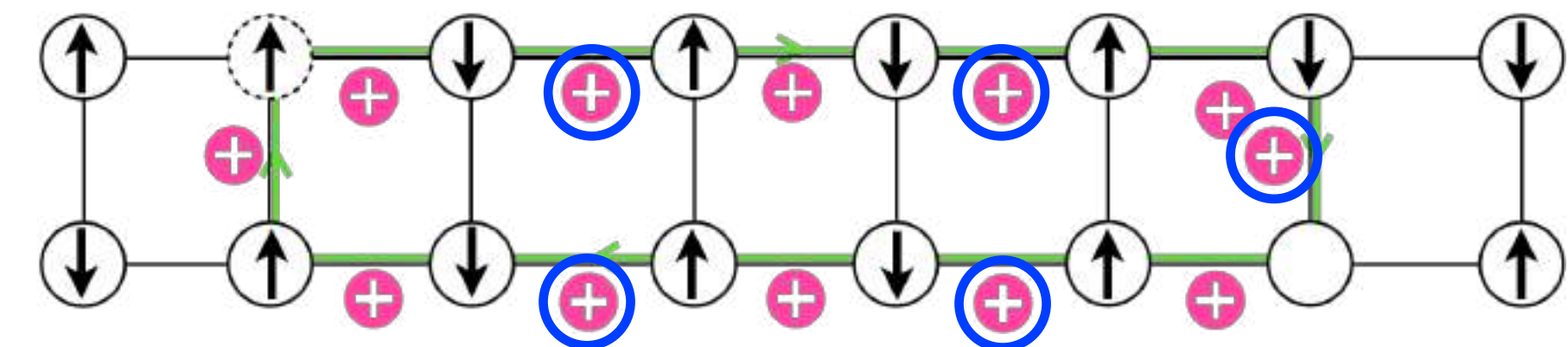


“+” (“-”) : The sign obtained when the hole exchanges its position with $\uparrow$ ($\downarrow$) spin during its motion

The hole hopping leaves a string of signs (phase strings) behind it, which is sensitive to the configuration of spins.



Quantum destructive interference plays a fundamental role in describing the long-distance behavior of the hole.



符号がtrivialになる例：

- Half filling
- Nagaoka ferromagnetic state

Phase string theory in the Hubbard model (1)

Hubbard model $\mathcal{H} = \mathcal{H}^T + \mathcal{H}^I$

$$\mathcal{H}^T = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{H.c.}]$$

$$\mathcal{H}^I = U \sum_j \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow},$$

Slave-fermion formalism

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

$h_i^\dagger$: fermionic holon creation operator

d_i : fermionic doublon annihilation operator

$b_{i,\sigma}$: bosonic spinon annihilation operator

$(-\sigma)^i$ is introduced to take into account the Marshall sign, which gives an exact description of the ground state at half filling.

Constraint on physical Hilbert space

$$h_i^\dagger h_i + d_i^\dagger d_i + b_{i,\uparrow}^\dagger b_{i,\uparrow} + b_{i,\downarrow}^\dagger b_{i,\downarrow} = 1$$

$$\mathcal{H}^T = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle} [\hat{\mathcal{P}}_{i,j} + \hat{\mathcal{S}}_{i,j}^\uparrow - \hat{\mathcal{S}}_{i,j}^\downarrow] + \text{H.c.},$$

$$\mathcal{H}^I = U \sum_j d_j^\dagger d_j,$$

quantum interference

where

$$\hat{\mathcal{P}}_{i,j} = \sum_{\sigma} (b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,-\sigma}^\dagger h_i d_j + b_{j,\sigma}^\dagger b_{i,-\sigma}^\dagger h_j d_i) \quad \bigcirc \quad \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \downarrow \\ \hline \end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \downarrow \\ \hline \end{array}$$

creates a spinon pair and annihilates a holon and doublon pair

$$\hat{\mathcal{S}}_{i,j}^\sigma = b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} h_j^\dagger h_i + b_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} d_j^\dagger d_i \quad \bigcirc \quad \begin{array}{|c|} \hline \downarrow \\ \hline \end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \downarrow \\ \hline \end{array} \quad \bigcirc$$

swaps a holon/doublon with a spinon with spin σ .

Spanning the Hilbert space with the basis

$$\{|\alpha\rangle = d_{l_1}^\dagger \cdots h_{m_1}^\dagger \cdots b_{i_1,\uparrow}^\dagger \cdots b_{j_1,\downarrow}^\dagger \cdots |0\rangle\}$$

The partition function is given as (high-temperature expansion)

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \sum_{\alpha_i} \prod_{i=0}^{n-1} \langle \alpha_{i+1} | (-\mathcal{H}) | \alpha_i \rangle$$

Phase string theory in the Hubbard model (2)

Using positive-definite weight $W_h[c]$ for a closed path c ,

$$Z = \sum_c (-1)^{N[c]} W_h[c]$$

L. Zhang and Z.-Y. Weng, PRB **90**, 165120 (2014)

The sign factor is written as

$$N[c] = \underbrace{N_h^h[c] + N_d^d[c]}_{\text{The fermion signs of holons and doublons}} + \underbrace{N_h^\downarrow[c] + N_d^\downarrow[c]}_{\text{phase strings } -t_h \hat{S}_{i,j}^\downarrow}$$

The fermion signs of holons and doublons

(N_a^b : the total number of a-b exchange)

One hole case:

$$N[c] = \underline{N_h^\downarrow[c] + N_d^\downarrow[c]}$$

In the limit of $U \gg t_h$, doubly-occupied sites vanish

$$N[c] = \underline{N_h^\downarrow[c]}$$

If we **change the sign of hopping involving the exchange of a holon/doublon and a $\downarrow$ spin** accompanied by $-t_h \hat{S}_{i,j}^\downarrow$, we can remove phase strings.

The removal of phase strings is done by U(1) nonlinear transformation as

$$\begin{aligned} c_{j,\uparrow} &\xrightarrow{U(1)_{\text{NL}}} c_{j,\uparrow}, \\ c_{j,\downarrow} &\xrightarrow{U(1)_{\text{NL}}} (-1)^j [c_{j,\downarrow}(1 - \hat{n}_{j,\uparrow}) - c_{j,\downarrow} \hat{n}_{j,\uparrow}] \\ &= (-1)^j (-1)^{\hat{n}_{j,\uparrow}} c_{j,\downarrow}. \end{aligned}$$

We obtain phase-string-removed model for the Hubbard model as

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_r &= -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[e^{i\mathcal{A}_{i,j}^\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{H.c.} \right] + U \sum_j \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \\ \mathcal{A}_{i,j}^\sigma &= \phi^\sigma (\hat{n}_{i,-\sigma} + \hat{n}_{j,-\sigma} + 1) \quad (\phi^\uparrow, \phi^\downarrow) = (0, \phi) \\ &\quad \phi = \pi \end{aligned}$$

A gauge field that cancels out the Aharonov-Bohm phases arising from a flux bounded to down spins

Using $\mathcal{H}_r$, we can turn off phase-string effects.



Outline

- Introduction
 - String excitations in strongly correlated electron systems
 - Mid-infrared weights of optical spectrum
 - Phase strings
- Motivation and purpose
- Results
 - Optical conductivity
 - Single-particle spectral function
- Summary

Motivation

It is unclear how MIR weights actually are related to string excitations that are the result of a complex process.

Purpose

Isolating the unique effects of phase strings, we investigate how much S^z and phase strings contribute to the MIR weights of $\text{Re}\sigma(\omega)$.

Model and method

Hubbard model

$$\mathcal{H} = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_{\langle i,j \rangle} n_{i,\uparrow} n_{j,\downarrow}$$

$t - J_\perp - J_z$ model

$$\mathcal{H}^{t-J} = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + \sum_{\langle i,j \rangle} [J_\perp (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_z S_i^z S_j^z]$$

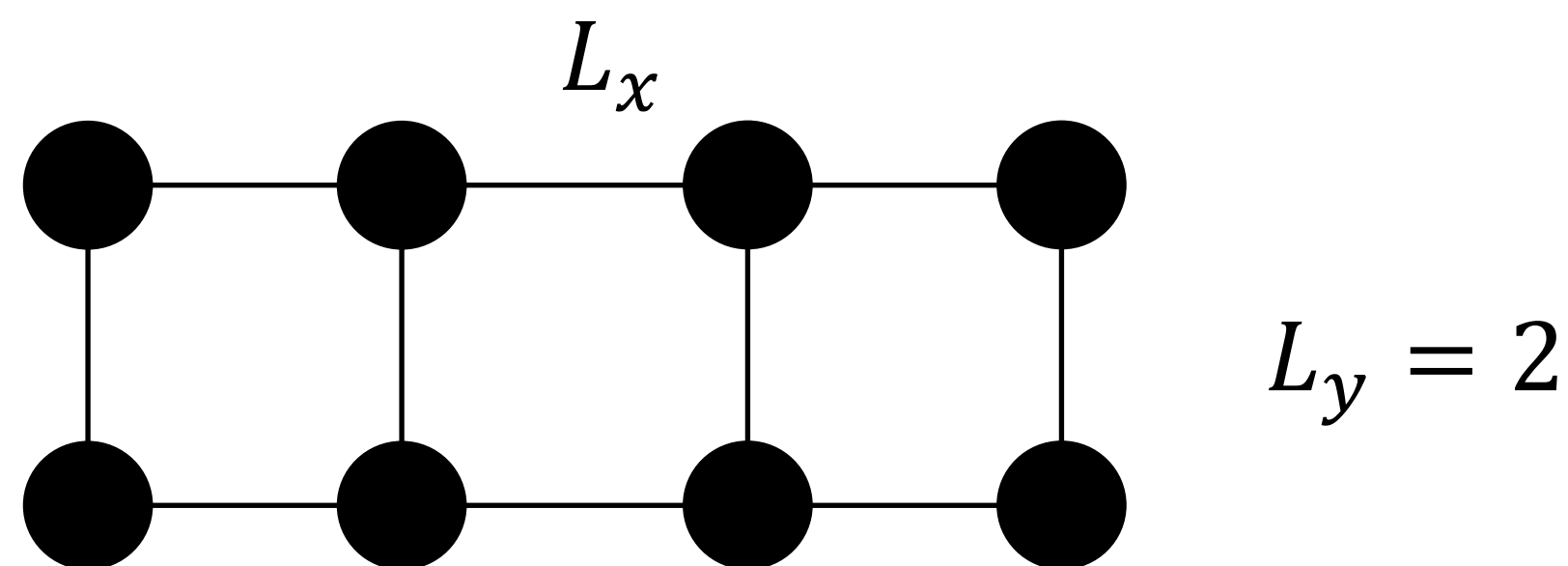
Electric field is introduced via the Peierls substitution

$$c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rightarrow e^{-iA(t)R_{ij}} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \quad A(t) = (A_x(t), 0)$$

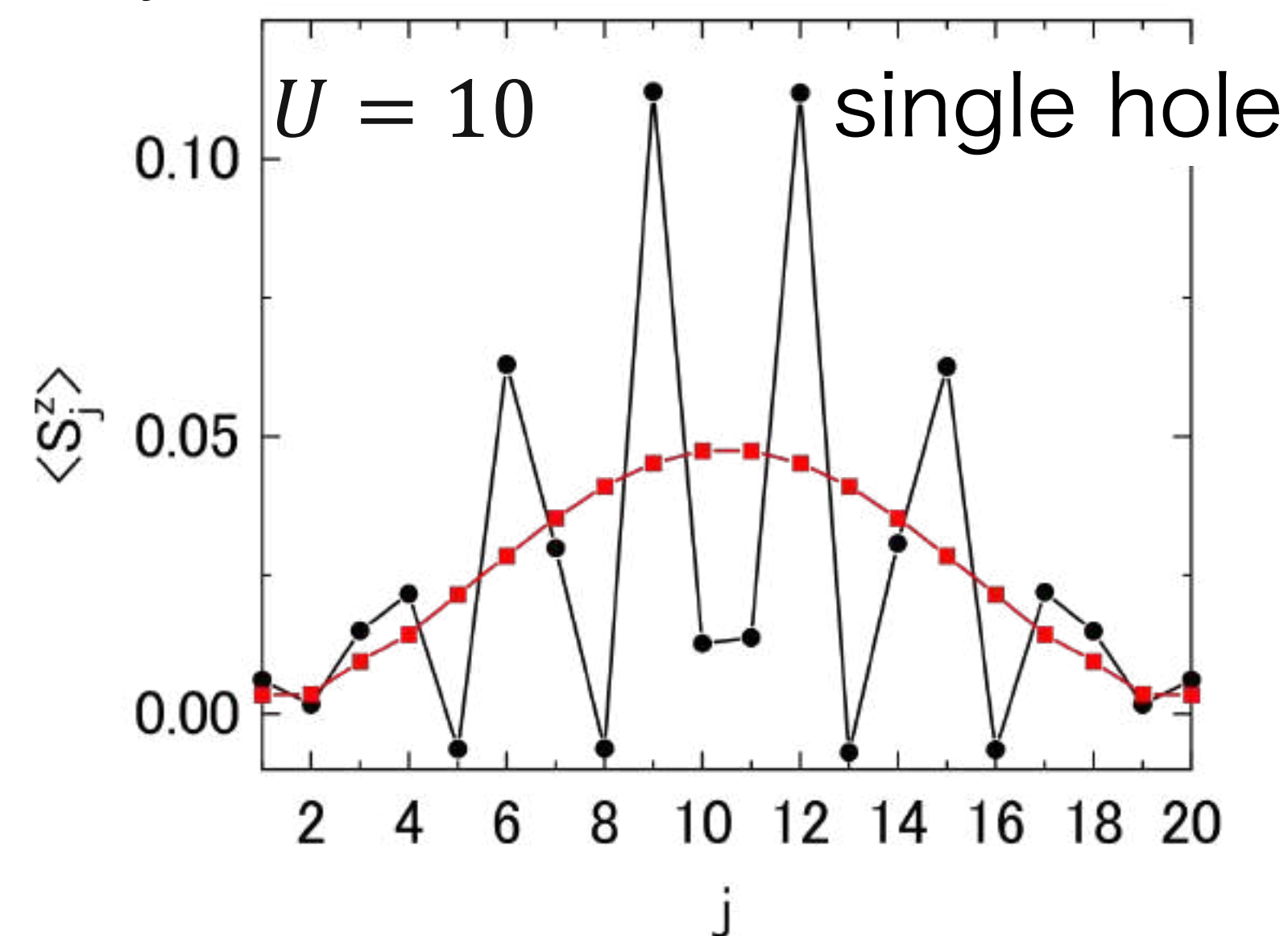
$$A_x(t) = A_0 e^{-(t-t_0)^2/(2t_d^2)} \cos[\Omega(t-t_0)] \quad A_0 = 0.001$$

Optical conductivity $\text{Re}\sigma(\omega)$ with $\sigma(\omega) = \frac{j(\omega)}{i(\omega + i\gamma)LA(\omega)}$

The time evolution of wave functions is calculated with the Lanczos and DMRG method under open boundary conditions.



Black: with PS
 Red: without PS
 $(L_x, L_y) = (20, 2)$



Staggered spin modulation disappears with the removal of phase strings.



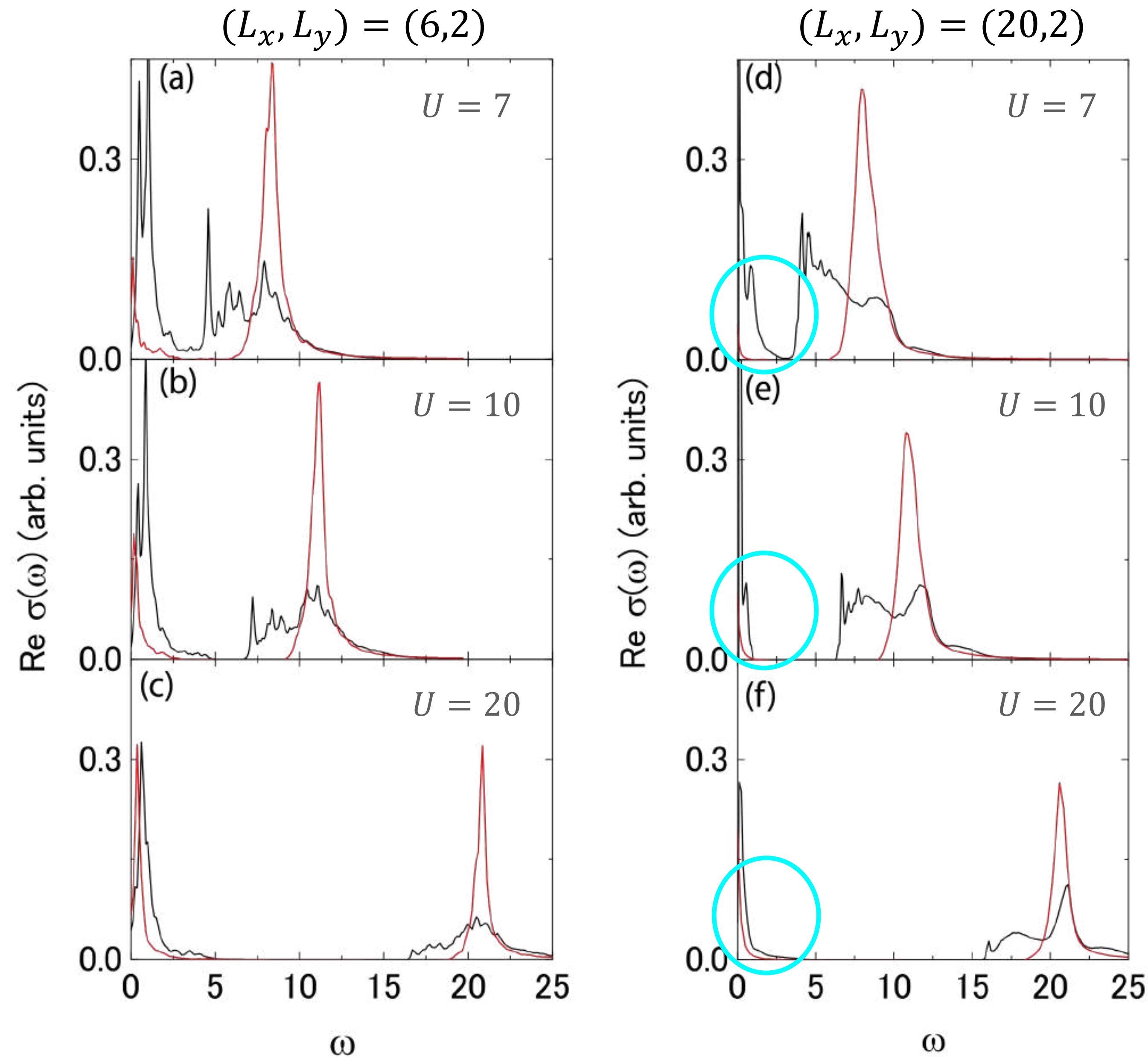
The formation of the Nagaoka polaron even for the intermediate U

Outline

- Introduction
 - String excitations in strongly correlated electron systems
 - Mid-infrared weights of optical spectrum
 - Phase strings
- Motivation and purpose
- Results
 - Optical conductivity
 - Single-particle spectral function
- Summary

Black: with PS
Red: without PS

Re(ω) of the Hubbard model with a single hole



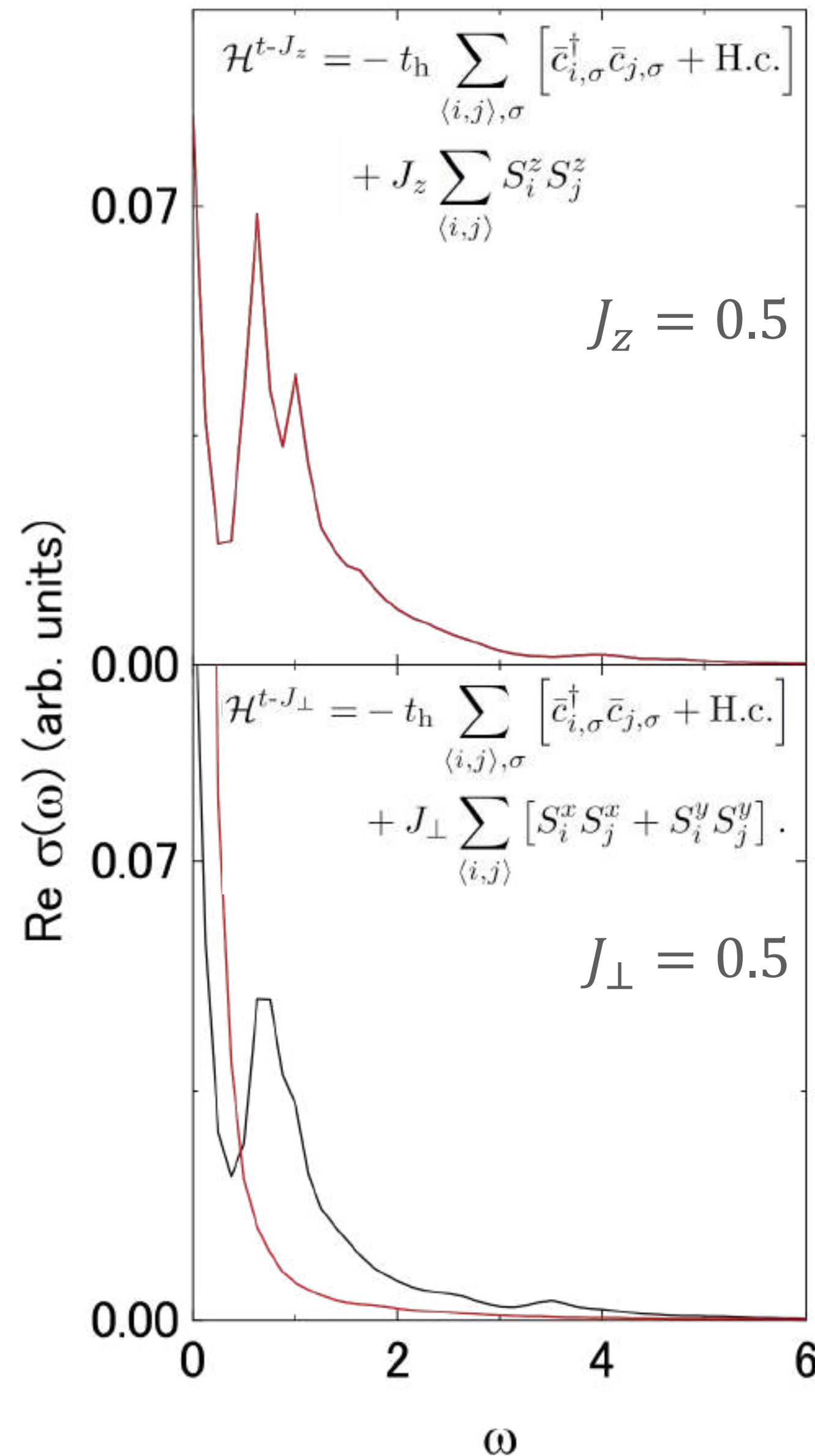
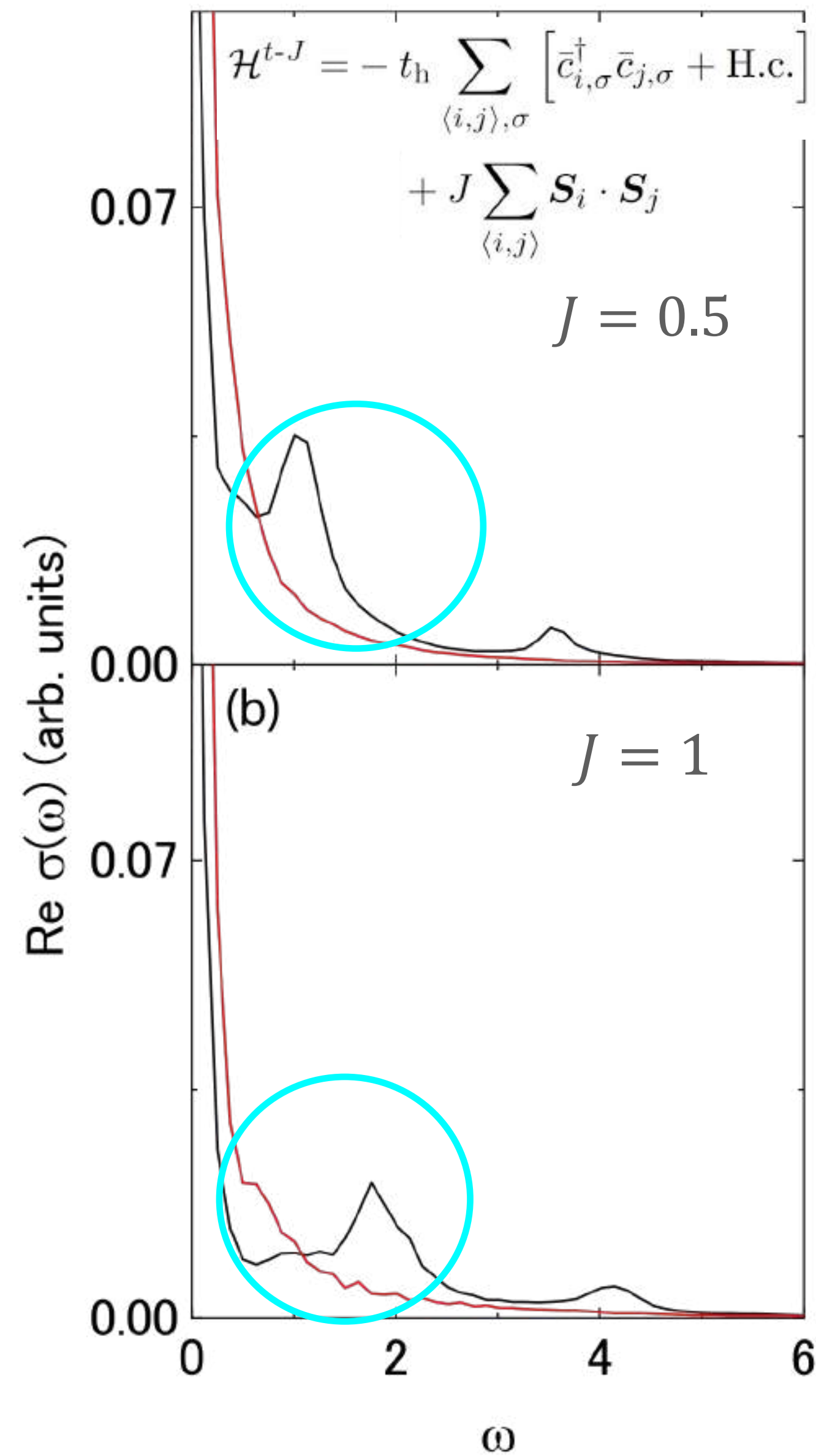
- $\omega_{\text{MIR}} \propto J = \frac{4t_h^2}{U}$.
- The removal of phase strings reduce spectral weights at MIR.
- The contribution from S^z strings remains, but is small.

Black: with PS
 Red: without PS

Re(ω) of $t - J$ model with a single hole

KS, S. Sota, and T. Tohyama,
 PRB 103, 035141 (2021)

$(L_x, L_y) = (20, 2)$



- The same behavior in MIR weights for t - J model as for the Hubbard model
- Strings consist only of S^z strings for t - J_z model.
 —> $\text{Re} \sigma(\omega)$ does not change before and after we remove phase strings.
- Strings consist only of phase strings for t - $J_\perp$ model.
 —> We can completely eliminate the effect of strings by removing phase strings.
- Phase strings play an important role in understanding MIR weights compared to S^z strings.

Outline

- Introduction
 - String excitations in strongly correlated electron systems
 - Mid-infrared weights of optical spectrum
 - Phase strings
- Motivation and purpose
- Results
 - Optical conductivity
 - Single-particle spectral function
- Summary

$A(k_x, \omega)$ of the Hubbard model

$$A_{k_y}(k_x, \omega) = A_{k_y}^{(e)}(k_x, \omega) + A_{k_y}^{(h)}(k_x, \omega)$$

$$A_{k_y}^{(e/h)}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\uparrow}^{(e/h)}(k_x, \omega)$$

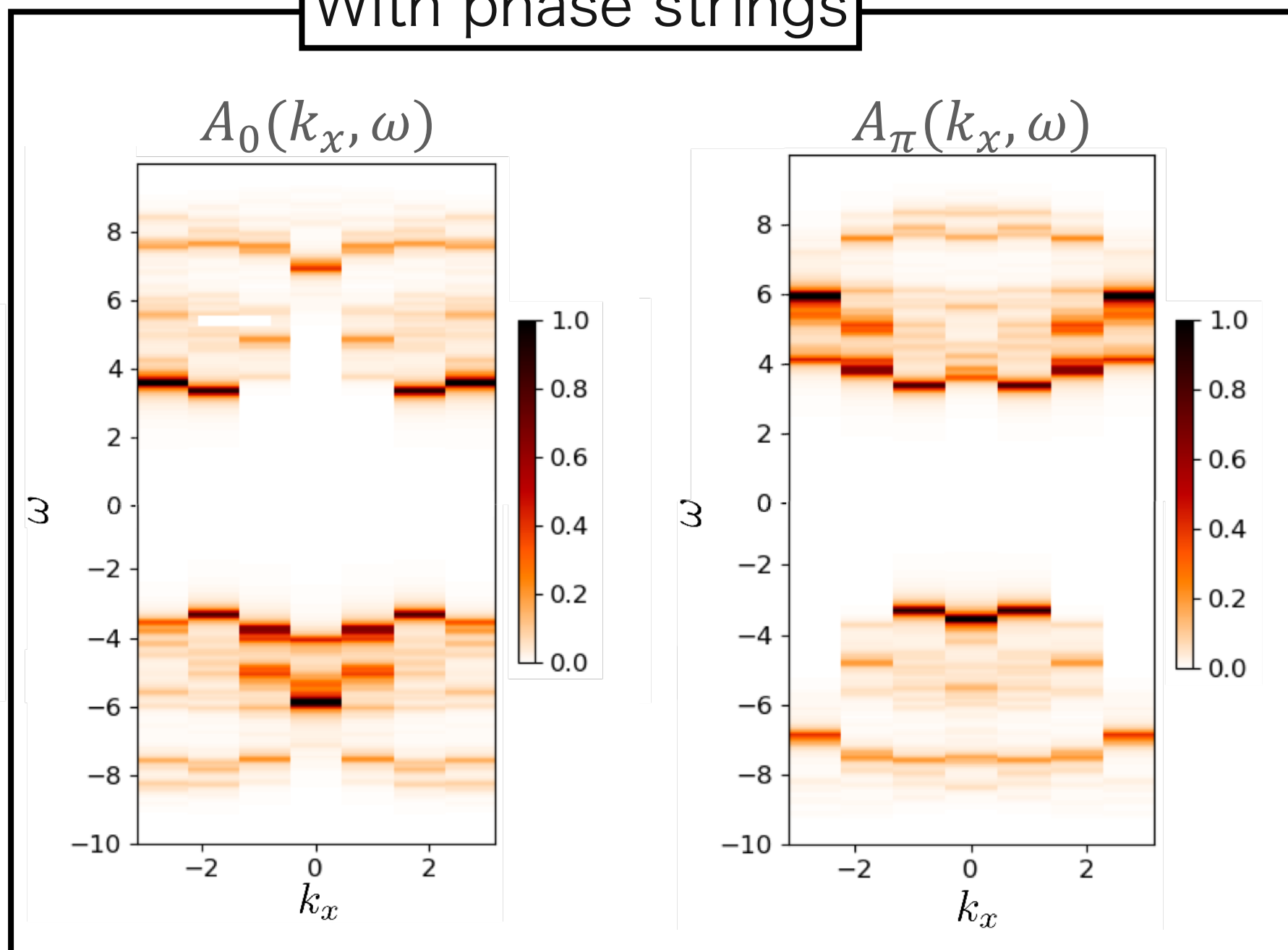
$$G_{\sigma}^{(e)}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \psi_0 | c_{\mathbf{k}, \uparrow} \frac{1}{\omega - (H - E_0) + i\eta} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} | \psi_0 \rangle,$$

$$G_{\sigma}^{(h)}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \psi_0 | c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \frac{1}{\omega + (H - E_0) + i\eta} c_{\mathbf{k}, \uparrow} | \psi_0 \rangle$$

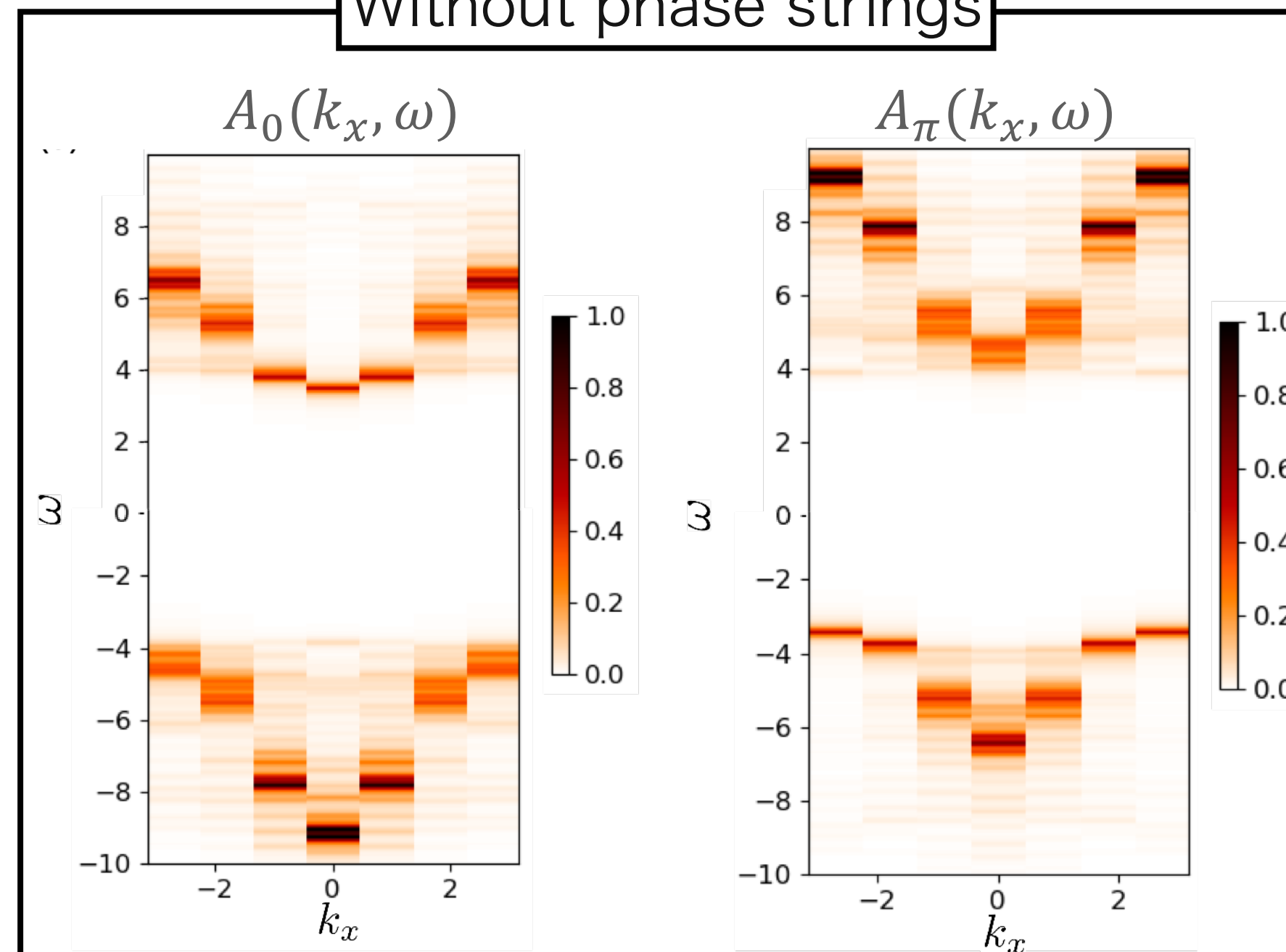
- Without phase strings, the upper and lower Hubbard bands have **cosine-like dispersions**.
- The removal of phase strings eliminates a nontrivial U(1) phase, which suppresses string excitations emerging in single-hole dynamics.

$(L_x, L_y) = (6, 2)$

With phase strings

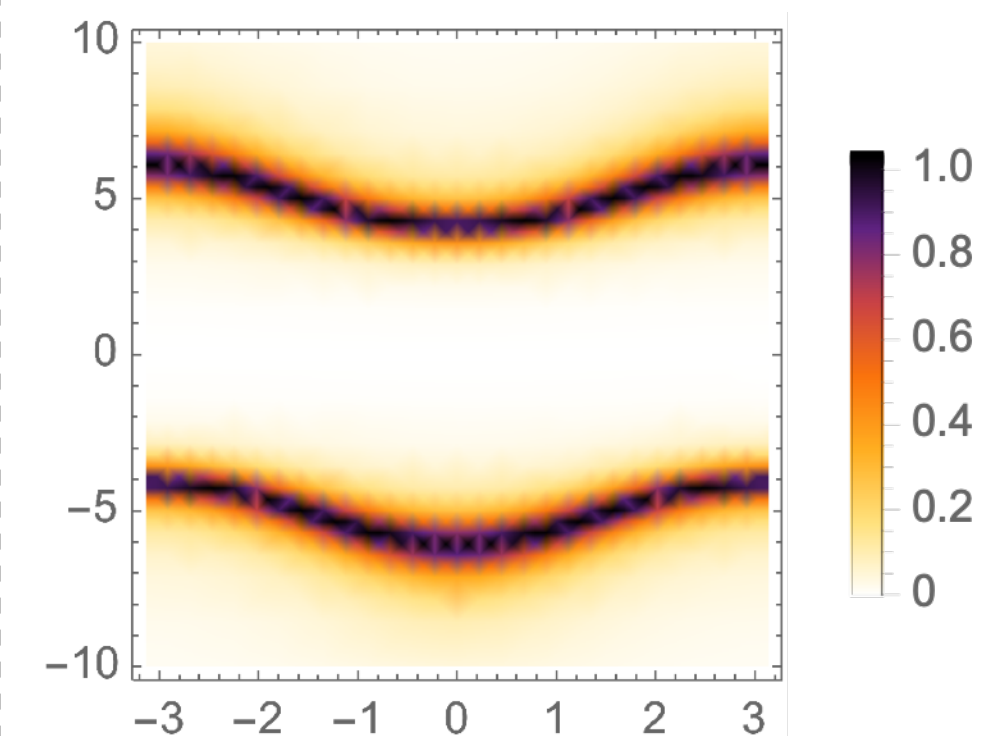


Without phase strings



KS, S. Sota, and T. Tohyama, PRB 103, 035141 (2021)

$A_0(k_x, \omega)$ obtained by the Hubbard-I



String excitations are completely ignored.

まとめ

- 強相関電子系におけるストリング励起は、スピン自由度と電荷自由度の間の非自明な相関を反映しており、古くから研究されてきた。
- しかし、問題の難しさゆえ、現在でもストリングの完全な理解には至っていない。
- 最近でも、人工的な系を使った量子シミュレーションでストリング励起の性質を調べる試みがされており、現在でも注目を集めている。
- 光学伝導度の中赤外の領域にある励起構造は、ホールとスピノンが生み出すストリングを反映して生まれた構造である。
- 我々は、ストリング励起の効果を S^z ストリングとphase ストリングに由来するものを分けて、それぞれが動的な性質にどのような影響を及ぼすのかを調べた。
- S^z ストリング：量子スピントリップで解消可能な局所的なもの
- phase ストリング：量子スピントリップで解消不可能な非局所的なもの
- 時間依存ランチョス法および密度行列繰り込み群法を用いて、1ホールドープした二本脚梯子ハバード模型および t - J 模型の光学伝導度を計算した結果、**光学伝導度の中赤外領域にある構造の形成には、主に S^z ストリングではなく、phase ストリングから寄与が重要であることがわかった。**
- また、**phase ストリングを取り除くと、局所的なスピンの乱れを伴ったポーラロニックな構造が現れ、それはコサイン的な分散構造を一粒子スペクトル関数で持つことがわかった。**

Summary

- Using time-dependent Lanczos and DMRG, we have calculated $\text{Re}\sigma(\omega)$ of the Hubbard and $t - J$ ladders with a single hole.
- Isolating the unique effects of phase strings, we have investigated how much S^z and phase strings contribute to MIR weights of $\text{Re}\sigma(\omega)$.
- We have found that the MIR structure of $\text{Re}\sigma(\omega)$ is dominantly contributed not from S^z strings but from phase strings for the hole-doped Hubbard and $t - J$ ladders.
- If we remove phase strings, no phase is picked up by a doped hole. As a result, a spin-polaron accompanied by a local spin distortion emerges and a quasiparticle with a cosine-like energy dispersion is formed in single-particle spectral function.

Appendix

Phase stringの有用性

スレーブボソン： $c_{i,\sigma} = b_i^\dagger f_{i,\sigma}$ $\left[b_i^\dagger b_i + \sum_{\sigma} f_{i,\sigma}^\dagger f_{i,\sigma} = 1 \right]$

スレーブフェルミオン： $c_{i,\sigma} = f_i^\dagger b_{i,\sigma}$ $\left[f_i^\dagger f_i + \sum_{\sigma} b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} = 1 \right]$

- 1つのU(1)ゲージ場がホロンとスピノンを結合する.
- 強結合極限では良くても、条件を緩めると深刻な問題に直面する.

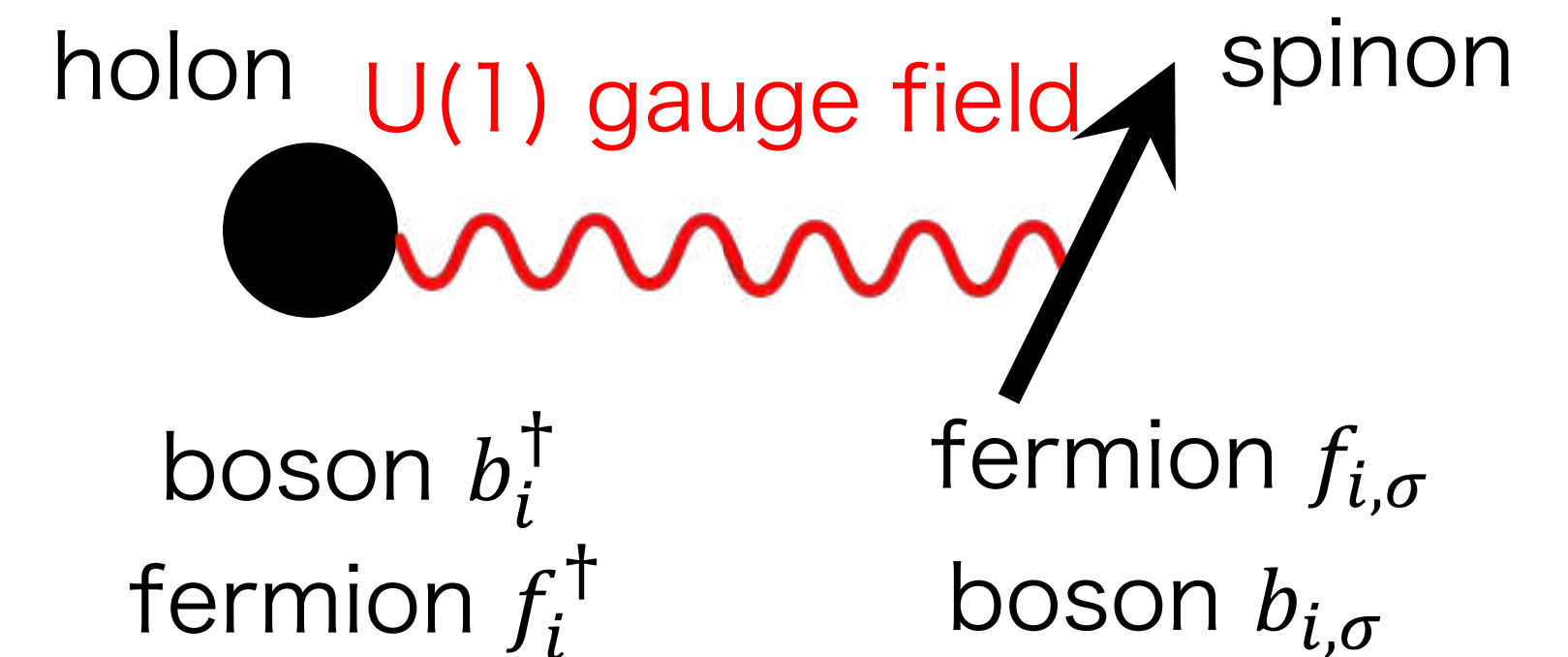


phase string分解によるボソン化

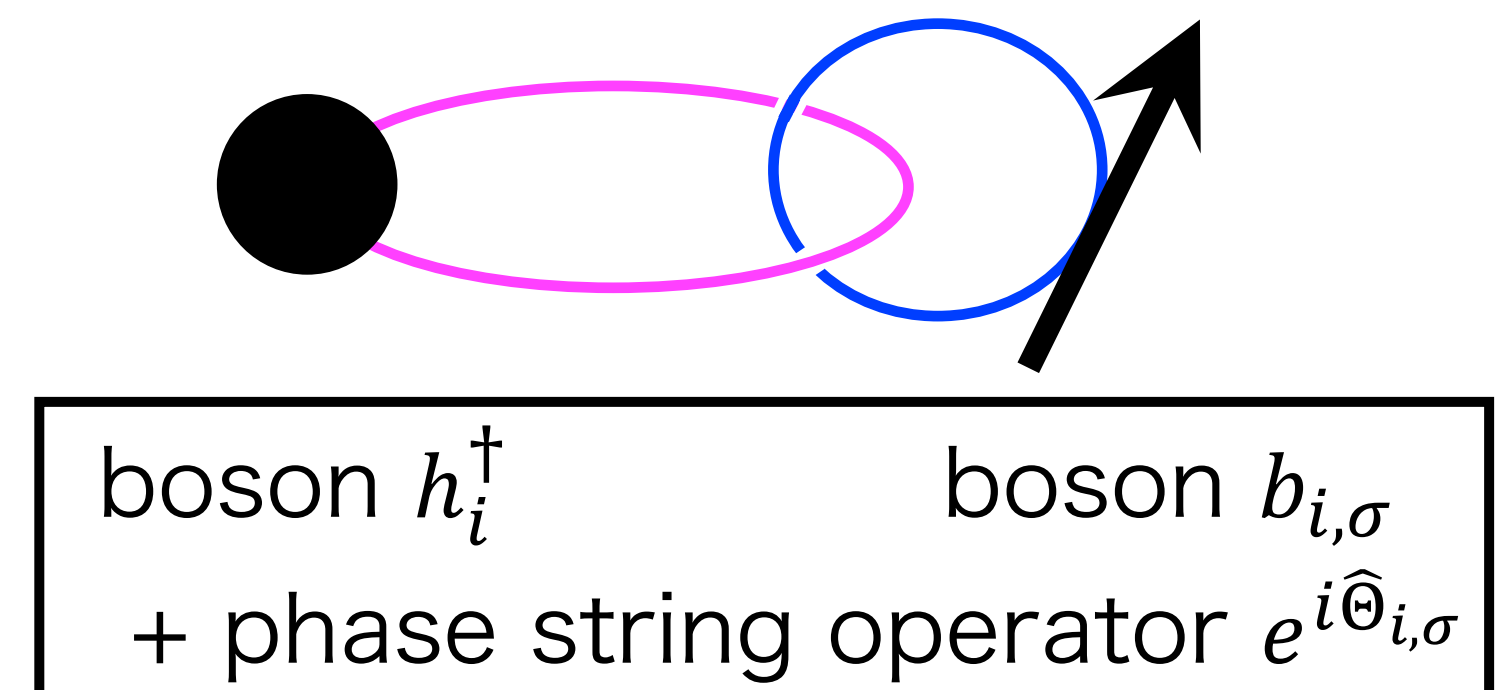
$$c_{i,\sigma} = h_i^\dagger b_{i,\sigma} e^{i\hat{\Theta}_{i,\sigma}}$$

- ホロンに作用するゲージ場とスピノンに作用するゲージ場は異なる.
- 2つのゲージ場の間にはトポロジカルな拘束条件がある.
- 強結合極限から条件を緩めても、理論的な記述が可能な余地がある.

S.-P. Kou, *et al.*, PRB **71** 235102 (2005)

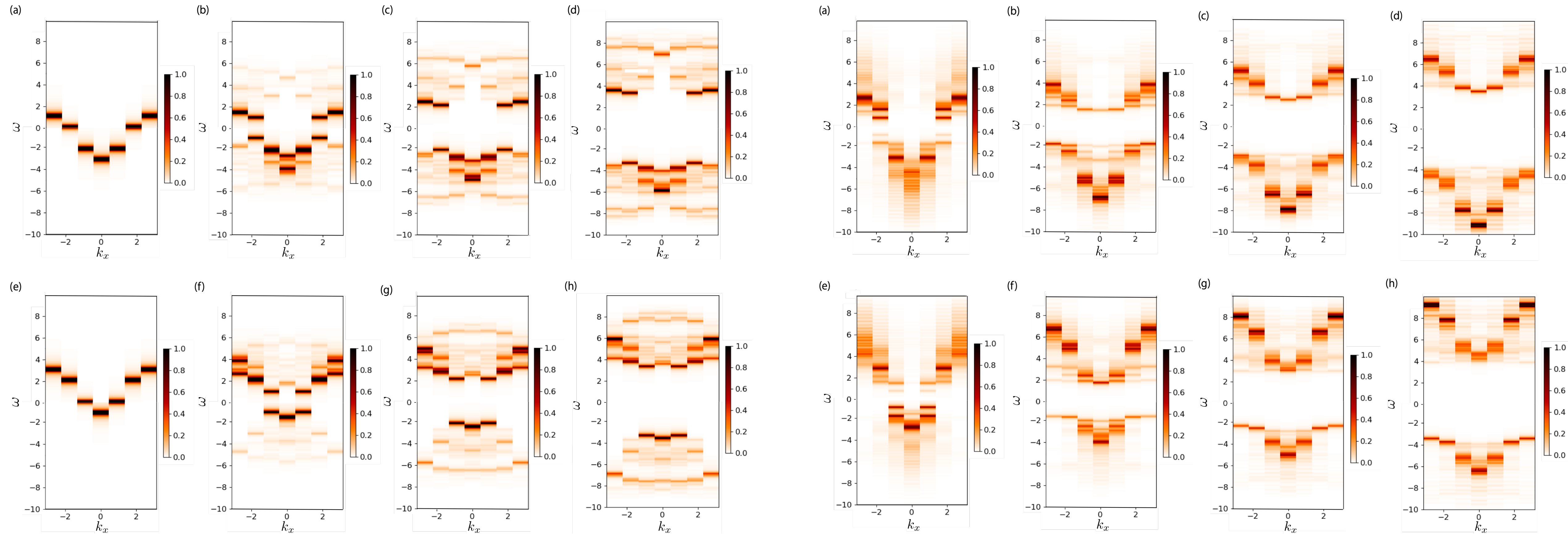


U(1)×U(1) topological gauge field



$A(k_x, \omega)$ of the Hubbard model

$(L_x, L_y) = (6, 2)$



$$A_{k_y}(k_x, \omega) = A_{k_y}^{(e)}(k_x, \omega) + A_{k_y}^{(h)}(k_x, \omega)$$

$$A_{k_y}^{(e/h)}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\uparrow}^{(e/h)}(k_x, \omega)$$

$$G_{\sigma}^{(e)}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \psi_0 | c_{\mathbf{k}, \uparrow} \frac{1}{\omega - (H - E_0) + i\eta} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} | \psi_0 \rangle,$$

$$G_{\sigma}^{(h)}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \psi_0 | c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \frac{1}{\omega + (H - E_0) + i\eta} c_{\mathbf{k}, \uparrow} | \psi_0 \rangle$$

KS, S. Sota, and T. Tohyama,
PRB 103, 035141 (2021)

The equation of motion for the Green function

Electron annihilation operator is splitted into the two parts:

$$c_{i,\sigma} = f_{i,\sigma} + g_{i,\sigma}$$

with

$$f_{i,\sigma} = \hat{n}_{i,-\sigma} c_{i,\sigma},$$

$$g_{i,\sigma} = (1 - \hat{n}_{i,-\sigma}) c_{i,\sigma}$$

$$\begin{pmatrix} [f_{i,\sigma}, \mathcal{H}^I] = U f_{i,\sigma} \\ [g_{i,\sigma}, \mathcal{H}^I] = 0 \end{pmatrix}$$

Defining the Green function

$$G_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T \alpha_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle$$

with $\alpha, \beta \in \{f, g\}$, the equation of motion is written as

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, \tau) = \delta(\tau) \langle \{ \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k},\sigma} \} \rangle - \langle T [\alpha_{\mathbf{k},\sigma}(\tau), \underline{H}] \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle.$$

The equation of motion for the Green function

$$[g_{i,\uparrow}, \mathcal{H}^T] \simeq -\frac{t_h}{2} \sum_{j \in \text{NN}(i)} c_{j,\uparrow} + \xi_{i,\uparrow} - \underbrace{t_h \sum_{j \in \text{NN}(i)} c_{j,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow} c_{i,\uparrow}}$$

The coupling of a hole to a pairing excitation
--> significant contribution only for $U < 0$

$$\xi_{i,\uparrow} = \sum_{j \in \text{NN}(i)} (c_{j,\uparrow} S_i^z + c_{j,\downarrow} S_i^-)$$

$$[g_{i,\uparrow}, \mathcal{H}_r^T] \simeq -\frac{t_h}{2} \sum_{j \in \text{NN}(i)} c_{j,\uparrow} + \tilde{\xi}_{i,\uparrow}$$

Scattering process related to transverse component of spin S^- disappears for phase-string-removed model.

$$\tilde{\xi}_{i,\uparrow} = \sum_{j \in \text{NN}(i)} c_{j,\uparrow} S_i^z$$