

Hubbard 模型の強磁性について

筑波大学物理学系 久保健

単バンド Hubbard 模型は金属強磁性の模型として、と多く用いられる。その理由は金属強磁性を示し得る模型としてこの模型が最も簡単だからであろう。しかしこの模型といえども一次元系を除き正確に解ける訳ではない。そこで各種の近似理論が開発され適用されて来たが、それらの結果は必ずしも一致しておらず、この模型が金属強磁性を示し得るが否かの結論は未だに得られていない様に思われる。そこで従来の代表的な結果について眺め、あわせて最近我々が行った来た高温展開の方法の結果を御紹介したい。

よく知られている様に単バンド Hubbard 模型は次の様に書き表わされる。

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

この系を記述するパラメータは t_{ij} と格子構造で決まるエネルギーバンド、 U 、電子数密度 n が温度 T である。エネルギーバンドには無限の可能性があり得るが、以下では主に最隣接格子点間のみ t_{ij} を持つ系について議論するのでそれと書く事とする。又バンド巾を W と表わす。

この系の基底状態は U が小さい時運動エネルギーを最小にする常磁性状態である。(但し $n=1$ の場合は反強磁性の場合もある。) U が大きくなると相互作用エネルギーを低くする強磁性状態が安定化するというのが最も簡単な Hartree Fock 近似の考え方である。強磁性になる条件は $U \cdot \rho(\epsilon_F) > 1$ であるが他の秩序状態(スピン密度波、反強磁性)の可能性もある。sc 格子に対して Penn はこれらの競合を調べ相図を求めたがそれによれば $U/W \geq 2$ では n の広い範囲で強磁性が安定である。しかし Hartree Fock 近似にはいわゆる相関効果がとり入れられておらず $U \geq W$ の領域では不十分である。相関効果は常磁性状態のエネルギーを下げるから強磁性は起りにくくなる。この相関効果をとり込む理論として Kanamori 理論、Gutzwiller 変分法、Green 関数の方法が知られている。

Kanamori 理論では二体の散乱を正確に扱う事により実効的な相互作用の強さ U_{eff} が相関効果により $U \rightarrow \infty$ でも W のオーダーに抑えられる事が示された。この理論は $n \ll 1$ の時に正しいが、この時強磁性が生じる条件は状態密度に強く依存し、Ni の様にフェルミ面に顕著なピークを持つ事が必要である。しかし具体的に単バンド模型で状態密度がバンド端で発散する fcc 格子にこの理論を用いるとバンド端で $U_{eff} \rightarrow 0$ となり強磁性になるかどうか明らかではない。

Gutzwiller の変分法では基底状態の変分波動関数として $\Psi = \prod_i (1 - \eta_i n_{i\downarrow}) \Psi_0$ をとる。ここで Ψ_0 は一体の波動関数、 η は電子が同じ site を占める確率の減少を表わす変分パラメータでエネルギー期待値を最小にする様と決められる。しかしこの様な簡単な変分関数を選んでエネルギー期待値は計算不可能であり、近似法として秩序無秩序転移に対する Kikuchi 近似の様な方法が用いられている。最近の Takano-Okiji の結果によれば sc, bcc 格子では $U \geq 2 \sim 3 W$ から $\frac{1}{2} \geq n \geq \frac{2}{3}$ まで、又 fcc では $U \geq 2W$, $n > 1$ で強磁性基底状態が得られている。

Green関数を近似する方法としては Hubbard III の方法が良く知られているが、いわゆる scattering correction のみを採り入れた場合は、反対向スピン電子の運動を止めようとする分布させた時の CPA に一致する。この場合にはこの様なバンドに於ても常磁性状態の帯磁率は発散しない事が Fukuyama-Ehrenreich により示されている。

以上に見て来た方法では一致した結論は得られこいない。しかし Kanamori 理論でも変分法でも U が大きい程強磁性となりやすい。よれ故この模型が強磁性を示すか否かを知らなければ $U=0$ の場合さえ調べれば良いであろう。 $U=0$ の場合相関効果が完全に働いて常磁性状態でも強磁性状態でもポテンシャルエネルギーは零である ($n < 1$)。よれ故分子場理論とは逆に強磁性状態の方が運動エネルギーが低くなるければ強磁性は出現しない。この様な事が確かに電子数が格子数に比べ1だけ小さい場合には起っている。この場合 Nagaoka により sc, bcc, fcc ($t > 0$), hcp ($t > 0$) は強磁性基底状態を持つ事が証明された。又 Brinkman-Rice は系の(つまり一個の空孔の)状態密度をスピンがランダムに向いているとして計算し、強磁性状態に比べ約 20% バンド端が荷上する事を示した。よれではこの結果から空孔の密度 $1-n$ が充分小さい時系は強磁性になると結論して良いであろうか? 確かに Hartree-Fock 近似や Gutzwiller の方法の結果ではそうなっている。しかし空孔が一個の場合は互に反交換関係がハミルトニアンマトリックス要素の符号を変えないが2個以上空孔が存在すればそうではなく、反交換関係が重要な働きをすると考えられる。例えば有限個の格子点に2個の空孔が存在する時基底状態は一意になる事が多い。言い換えると2個の空孔の相互作用は反強磁性的に働くと考えられる。

よれで我々の帯磁率を高温展開の方法で計算し有限温度で帯磁率が発散するか否かを調べてみた。非摂動ハミルトニアンは化学ポテンシャル μ を導入して $N_0 = -\mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}$ とし、摂動ハミルトニアン H_1 として (1) 式の第一項をとる。以下では電子2個が同一サイトを占める状態をすべて除外して考えるので (1) 式の第二項は表に現われない。熱力学ポテンシャル Ω 、帯磁率 χ を H_1 に μ として展開すると結果は以下の様になる。

$$(\Omega - \Omega_0) / N_L = -\beta^{-1} p (1-2p) \sum_{r=2}^{\infty} \frac{(\beta t)^r}{r!} A_r(p) \quad (2)$$

$$(\chi - \chi_0) / N_L = 2\beta p^2 (1-2p) \sum_{r=3}^{\infty} \frac{(\beta t)^r}{r!} B_r(p) \quad (3)$$

ここで Ω_0, χ_0 は非摂動項、 β は温度の逆数 p は非摂動系に於ける電子数密度の $1/2$ で $p = \frac{e^{\beta\mu}}{1+2e^{\beta\mu}}$ で与えられる。 $A_r(p), B_r(p)$ は各々 $(r-2)$ 次、 $(r-3)$ 次の多項式である。一次元系の帯磁率は χ_0 に等しい事に対応して χ の級数は3次から始まる。簡単な議論から Ω の級数も χ の級数も $p=0$ 及び $p=1/2$ では有限温度で絶対収束する事が示される。これはそれゆえに電子或いは空孔が一個だけ存在している場合に相当している。又 $B_r(0)$ の符号は $(-1)^{r-1}$ 、 $B_r(1/2)$ の符号は常に正である。 $B_r(1/2)$ の符号が正であることは Nagaoka の結果に一致している。我々は sc, bcc, fcc に対し $A_r(p), B_r(p)$ を9次まで求めたが得られた $A_r(p), B_r(p)$ は互に反交換関係の為に激しく振動する事が見出された。実際それらはすべての零点を $(0, 1/2)$ に持っている。又すべての場合に $|B_r(p)/B_r(0)| < 1$ が成り立っている事が見出された。特に $p=1/2$ ではその値は r と共に急速に減少する。その様子を図1に示す。

$B_r(0)$ の級数は有限温度で絶対収束する事が判、 r の値が $|B_r(P)/B_r(0)| < 1$ が任意の $r > 9$ に対しても成立するならば級数は発散しない。 $r \leq 9$ での振舞から見てこの予想は $P \approx \frac{1}{2}$ では特によく成立する様に見える。

一方 Ω の高温展開から n の高温展開を求め、それを用いて変数を P から $P_0 (= \frac{\pi}{2})$ に変換すると P_0 を一定とした時の χ の高温展開が得られる。それは(3)式と同じ形をして r の係数を

$\tilde{B}_r(P_0)$ と表わすと、 $\tilde{B}_r(P_0)$ は $B_r(P)$ に比べ振動のゆるやかな関数である。一方 $B_r(P)$ の持っていた規則的な性質は失われる。この $\tilde{B}_r(P_0)$ を用いて $\frac{d}{dP_0} \log \chi$ の高温展開を求め、fccの場合に Padé の方法で解析してみた。^{*} $P_0 \leq 0.45$ の領域では T_c を与えないパデ近似も多く、得られた T_c の値も散らばる。 $P_0 \approx 0.475$ の領域では多くのパデ近似が $T_c/t \approx 0.5$ の付近に T_c を与える事が見出された。 $[n, m]$ 近似

の $n-m$ を一定にして $n+m=6$ 及び 8 ($n-m=even$)

の二点、或いは $n+m=7$ 及び 9 ($n-m=odd$) の二点を $n+m=\infty$ に外挿した値を図2に示す。

但し $n-m=0$ の場合 $[4,4]$ 近似は T_c を与えない。この結果から見るとこの領域では有限の T_c が現われる可能性があるが、これは P を変数とした時の結論と矛盾している。

この部分では高次の係数の大きさが相対的に小さいので強磁性的な寄与を与える3次・4次の係数の影響が強くなり、 r の可能性もある。結果は未だ充分収束していませんとほえず、どちらにしても更に高次の係数を調べなければ結論は得られない様である。

最近 Takahashi により 12 個の格子点を持つ系の基座状態が調べられた。それによれば fcc, hcp の構造を持つ系はほとんど全ての電子数に対して完全強磁性基座状態を持つ事が判った。しかしこれら三角形の網目構造を持つ系では小数系はバルク系よりも強磁性になりやすい事が予想されるので、この結果が直ちにバルク系に結びつくかどうかは明らかではない。

以上述べて来た様に $U=\infty$ の場合とさえ単バンド Hubbard 模型が強磁性相転移を示すかは未だに充分判っていない。

*) 以前我々が ICM 82 Kyoto で発表した Padé の計算に若干の誤りがあり、それを訂正した結果、結果が非常に変わりました。

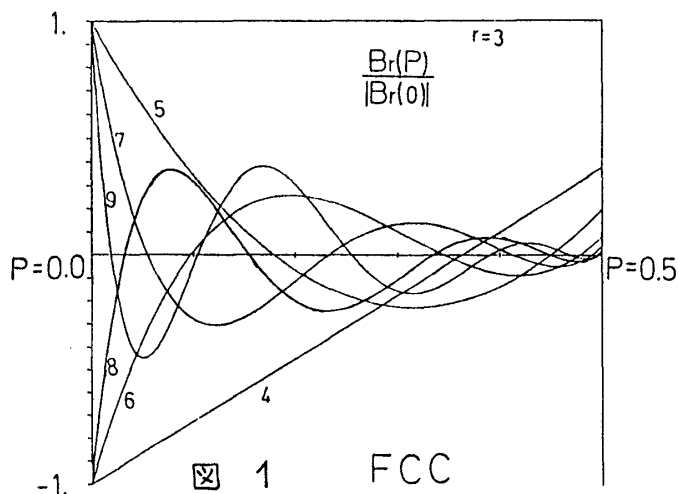


図 1 FCC

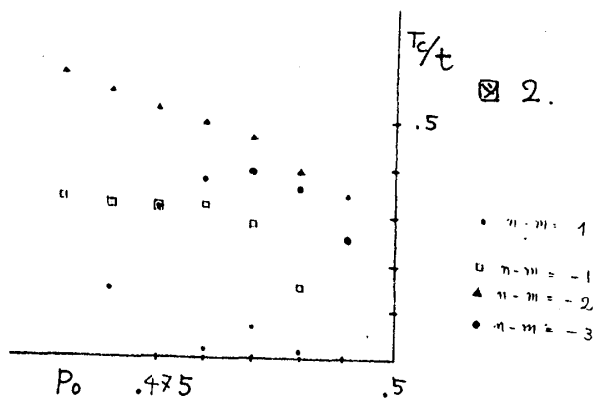


図 2.