A SELF-CONSISTENT TREATMENT OF HUBBARD MODEL FOR THE ANTIFERRO-MAGNETIC CASE

九大理　末崎幸生

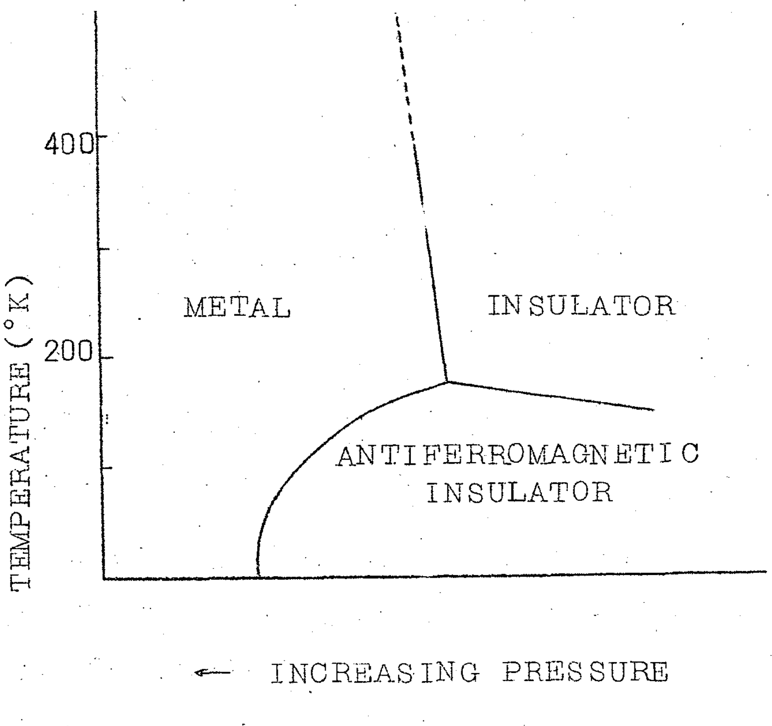
（12月8日受理）

§0. 序

強いクーロン相関エネルギーが働いているような電子系，例えば遷移金属及びその酸化物等を表現するハミルトニアンとしてHubbardは所謂Hubbard modelを提唱した。[1),2)]

以来多くの理論的研究がこの相関問題についてなされ，[3)]一次元においては反強磁性的基底状態を持つ厳密解がLiebとWuによって解かれた。[4)] 然し2次元・3次元の場合には未だ解けていない。

一方1969年にはベル研究所の実験グループが $(V_2O_3)_{1-x}M_x$ (M= Cr, V) の合金系で第0図に示すような大変興味ある相図を発見している。[12)] 即ちバンド巾と相関エネルギーUの比を変えていくと（圧力）常磁性絶縁体，金属，反強磁性絶縁体の3相が存在しうることである。従ってHubbard Modelがこの系の本質的性質を具現する候補として最有力であるとする立場から近年反強磁性的転移温度を理論的に計算した幾つかの例が発表されている。[6),7),8)] 計算方法は各々異り，有限温度の変分法，Ground Stateの波動関数を求める方法及び分配関数の特殊な求め方等である。

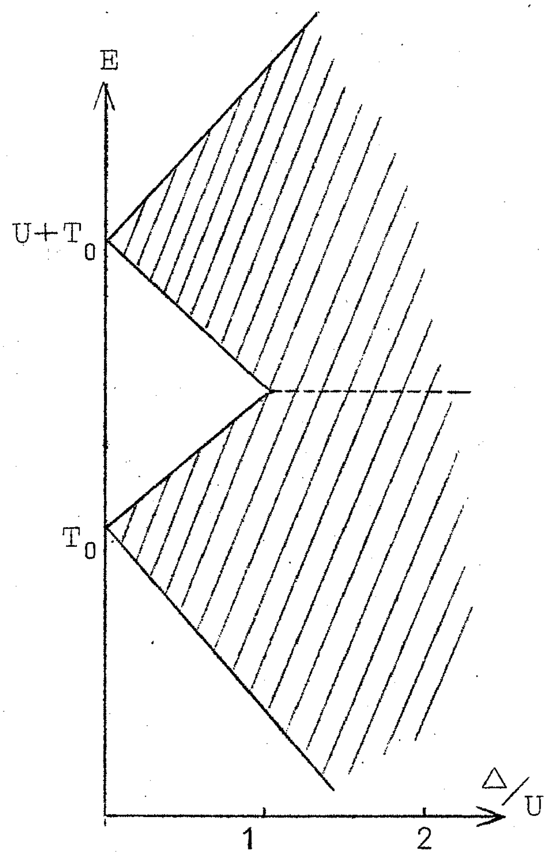


第0図

Hubbardは1価の物質で常

磁性的なとき第3論文[2)]で（以後HⅢと略記する）高次の Green 関数を Decouple して self-consistent な解を求め，バンド巾△とクーロン斥力Uの比 Δ/U の関数として金属絶縁体間の2次の転移を示す解を得た。（第1図）然しこの解は Herring が指摘しているように[9)] Fermi 面の異常に性質を持っており，又，運動量空間での1体の電子のスペクトルの明確な定義が出来ない。

この Fermi 面の異常な性質の困難を克服するため1価の物質の場合に反強磁性的 Ground State を予想して，又 bond alternation がある場合を含めて Hubbard と類似の近似によって，self-consistent に Green 関数を数値的に求めることを試みたのでここに示す。結果は金属絶縁体転移は出るが，反強磁性的状態はこのやり方では出ないようだという否定的なものであるが，計算の過程で興味ある性質が顕われるため敢えて発表し，諸氏の参考にしていただき，理論の不備を御指摘願えれば幸である。



第1図

近似の骨子は同じ site の相関及び最近接のスピン逆向きの反強磁性的相関をたち切らないようにし，異る3個の site にわたる相関は高次のものとして落とす。平均値は勿論，Green 関数自身を self-consistent に求める高次の R.P.A. である。この計算を実行した動機は反強磁性転移温度を求めた前述の計算[6), 7), 8)]が，HⅢのように Dynamic な量に関して self-consistent に解かれていないため，この事を追求する意義と必要があると考えたからである。

§1では Green 関数の定義とその数が多いため略記号を導入した。

§2では近似とその具体的計算を述べた。

§3では self-consistent な解を数値的に計算した結果を記述した。

§4には結論と bond alternation に関する簡単な考察を述べた。

§1. 定式化と略記号の定義

系の Hamiltonian は反強磁性的 Ground State を予想して格子系を A.B. Sublattice に分け，次の様に表わす。

$$(1)\quad H=\sum_{i\ell}^{\text{Nearest Nbr.}}\sum_{\sigma} t_{i\ell}\,(C_{i\sigma}^{A+}C_{\ell\sigma}^{B}+C_{\ell\sigma}^{B+}C_{i\sigma}^{A})+\sum_i^A U n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$
$$+\sum_\ell^B U n_{\ell\uparrow}n_{\ell\downarrow}-\mu\sum_i^A\sum_\sigma n_{i\sigma}^A-\mu\sum_\ell^B\sum_\sigma n_{\ell\sigma}^B\ .$$

ここで $C_{i\sigma}^A$, $C_{\ell\sigma}^B$ は各 A, B sublattice の i, ℓ site の σ spin の消滅演算子であり μ は Fermi エネルギーである。

2時間遅延 Green関数を採用し求めるべき1体の Green関数は

$$(2)\quad -i\theta(t)<[C_{i\uparrow}^A(t),\ C_{i'\uparrow}^{A+}]_+>\equiv\ll C_{i\uparrow}^A(t);\ C_{i'\uparrow}^{A+}\gg,$$

と表わせる。ここで多くの Green関数が出てくるので以下の略記を行う。(2)の右辺の時刻0の部分には以下全て $C_{i'\uparrow}^{A+}$ があるものとして(2)の Fourier変換を

$$(2)'\quad \ll C_{i\uparrow}^A\ ;\ C_{i'\uparrow}^{A+}\gg\ \equiv\ <i|>,$$

と表わす。又 site の記号は i, m を A-sublattice ℓ, n を B-sublattice のものとして採用して A, B の記号は省略する。運動を追う Green関数の略記号を第一表に示しておくが，第一表で段を区切ったのはその hierarchy の段階を示す。

次に平均値は

$$(3)\quad <n_{i\uparrow}^A>\ =\ <n_{\ell\downarrow}^B>\ \equiv\ \alpha\ ,\quad <n_{i\downarrow}^A>\ =\ <n_{\ell\uparrow}^B>\ \equiv\ \gamma\ ,$$

$$(4)\quad \alpha-\gamma=\sigma\ ,\quad (\alpha+\gamma=1)\ ,$$

のように略記する。

第　一　表

Level	
Level 0	$\ll C^{A}_{i\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle i|\rangle$
	$\ll C^{B}_{\ell\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell|\rangle$
Level 1	$\ll (n^{A}_{i\downarrow}-\gamma) C^{A}_{i\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle ii|\rangle$
	$\ll (n^{B}_{\ell\downarrow}-\alpha) C^{B}_{\ell\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell\ell|\rangle$
Level 2	$\ll (n^{A}_{i\downarrow}-\gamma) C^{B}_{\ell\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle i\ell|\rangle$
	$\ll (n^{B}_{\ell\downarrow}-\alpha) C^{A}_{i\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell i|\rangle$
	$\ll C^{A+}_{i\downarrow} C^{B}_{\ell\downarrow} C^{A}_{i\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle i\ell i|\rangle$
	$\ll C^{B+}_{\ell\downarrow} C^{A}_{i\downarrow} C^{A}_{i\downarrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell ii|\rangle$
	$\ll C^{B+}_{\ell\downarrow} C^{A}_{i\downarrow} C^{B}_{\ell\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell i\ell|\rangle$
	$\ll C^{A+}_{i\downarrow} C^{B}_{\ell\downarrow} C^{B}_{\ell\downarrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle i\ell\ell|\rangle$
Level 3	$\ll (n^{A}_{i\downarrow} n^{B}_{\ell\downarrow} - \alpha\gamma) C^{B}_{\ell\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle i\widetilde{\ell\ell}|\rangle$
	$\ll (n^{B}_{\ell\downarrow} n^{A}_{i\downarrow} - \alpha\gamma) C^{A}_{i\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell\widetilde{ii}|\rangle$
	$\ll (n^{A}_{i\downarrow}-\gamma) C^{A}_{m\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle im|\rangle$
	$\ll (n^{B}_{\ell\downarrow}-\alpha) C^{B}_{n\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell n|\rangle$
	$\ll C^{A+}_{i\downarrow} C^{A}_{m\downarrow} C^{A}_{i\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle imi|\rangle$
	$\ll C^{A+}_{m\downarrow} C^{A}_{i\downarrow} C^{A}_{i\downarrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle mii|\rangle$
	$\ll C^{B+}_{\ell\downarrow} C^{B}_{n\downarrow} C^{B}_{\ell\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell n\ell|\rangle$
	$\ll C^{B+}_{n\downarrow} C^{B}_{\ell\downarrow} C^{B}_{\ell\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle n\ell\ell|\rangle$
	$\ll (n^{A}_{i\downarrow} n^{A}_{m\downarrow} - \gamma^{2}) C^{A}_{m\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle i\widetilde{mm}|\rangle$
	$\ll (n^{B}_{\ell\downarrow} n^{B}_{n\downarrow} - \alpha^{2}) C^{B}_{n\uparrow} ; C^{A+}_{i'\uparrow} \gg = \langle \ell\widetilde{nn}|\rangle$

単純立方格子を想定すると Bond alternation は (1) 式の transfer integral t_{ij} が交互に大きさを変えるという効果をとり入れることにより考慮出来るが，このやり方は Narrow Band の物質については Adler と Brooks[10] の格子 potential を変化させるモデルより，より物理的に妥当ではないかと考えられる。この事については後に触れる。

§2. 近似と具体的計算

§1で定義した Green関数を具体的に計算の実行に移る。運動方程式

$$\omega < 0| > = <[0,\ c^{A+}_{i'\uparrow}]_+> + <[0,\ H]|> ,$$

に従って先づ

$$(5)\quad \omega < i| > = \delta_{ii'} + U < n_{i\downarrow} c_{i\uparrow}| > + \sum_{\ell} t_{i\ell} < \ell | > ,$$

$$(6)\quad \omega < \ell | > = U < n_{\ell\downarrow} c_{\ell\uparrow}| > + \sum_{i} t_{\ell i} < i| > ,$$

$$(7)\quad \omega < n_{i\downarrow} c_{i\uparrow}| > = \gamma\,\delta_{ii'} + U < n_{i\downarrow} c_{i\uparrow}| > + \sum_{\ell} t_{i\ell}\left[< n_{i\downarrow} c_{\ell\uparrow}| > + < i\ell i| > - < \ell i i| >\right] ,$$

$$(8)\quad \omega < n_{\ell\downarrow} c_{\ell\uparrow}| > = U < n_{\ell\downarrow} c_{\ell\uparrow}| > + \sum_{i} t_{\ell i}\left[< n_{\ell\downarrow} c_{i\uparrow}| > + < \ell i \ell| > - < i\ell\ell| >\right] .$$

(5) (6) 及び第一表より

$$(5)'\quad (\omega - \gamma U) < i| > = \delta_{ii'} + U < i i| > + \sum_{\ell} t_{i\ell} < \ell | > ,$$

$$(6)'\quad (\omega - \alpha U) < \ell | > = U < \ell\ell | > + \sum_{i} t_{\ell i} < i| > .$$

(7) − (1) × γ　　(8) − (2) × α　より

$$(7)'\quad (\omega - \alpha U) < i i| > = \alpha\gamma U < i| > + \sum t_{i\ell}\{< i\ell | > + < i\ell i| > - < \ell i i| >\} ,$$

$$(8)'\quad (\omega - \gamma U) < \ell\ell | > = \alpha\gamma U < \ell | > + \sum t_{\ell i}\{< \ell i| > + < \ell i \ell | > - < i\ell\ell | >\} .$$

(5)′〜(8)′は勿論近似のない厳密な式である。

(7)′, (8)′の右辺の最後の{…}の項の新たなGreen関数の運動を追うときHubbardがHⅢで実行したようにScattering correction (SC)とResonance Broadening correction (RBC)という概念を導入して近似する。即ち↑-spinの電子の運動を追う$<i\ell|>$, $<\ell i|>$については$t_{i\ell}c^{A+}_{i\uparrow}c^{B}_{\ell\uparrow}$, $t_{\ell i}c^{B+}_{\ell\uparrow}c^{A}_{i\uparrow}$との交換関係のみとり$<i\ell i|>$他については↓-spin電子に関するもののみとる。序にも述べたようにHⅢの方法を直接に用いないのはA, B sublatticeの逆向きスピンの相関をhierarchyの低次の段階でたち切る恐れがあるためである。

先づ$<i\ell|>$に対する運動方程式を求める。

$$(9)\quad \omega<n_{i\downarrow}c_{\ell\uparrow}|>=U<n_{i\downarrow}n_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}|> + \Sigma\, t_{\ell m}<n_{i\downarrow}c_{m\uparrow}|>+(\text{other terms}),$$

(9) − (6) × γ より

$$(9)'\quad \omega<i\ell|>=U<n_{i\downarrow}n_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}|>-\gamma U<n_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}|> + t_{\ell i}<ii|>+\sum_{m(\neq i)}{}' t_{\ell m}<im|>,$$
$$=U<i\widetilde{\ell\ell}|>-\gamma U<\ell\ell|>+t_{\ell i}<ii|>+\sum_{m(\neq i)}{}' t_{\ell m}<im|>$$

を得るが，新たな$<n_{i\downarrow}n_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}|>$については

$$(10)\quad \omega<n_{i\downarrow}n_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}|>=U<n_{i\downarrow}n_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}|>+\Sigma\, t_{\ell m}<n_{i\downarrow}n_{\ell\downarrow}c_{m\uparrow}|>.$$

ここで$<n_{i\downarrow}n_{\ell\downarrow}c_{m\uparrow}|>\cong\alpha<n_{i\downarrow}c_{m\uparrow}|>+\gamma<n_{\ell\downarrow}c_{m\uparrow}|>$, と近似して(10) − $\alpha\gamma$ × (6)をとると

$$(10)'\quad (\omega-U)<i\widetilde{\ell\ell}|>=-\alpha\gamma U<\ell\ell|>+\alpha\gamma^2U<\ell|>+\alpha t_{\ell i}<ii|> + \alpha\sum_{m(\neq i)}{}' t_{\ell m}<im|>+\gamma\sum_m t_{\ell m}<\ell m|>+\alpha\gamma\sum_m t_{\ell m}<m|>.$$

同様の近似で

$$(11)\quad \omega\langle \ell i|\rangle = U\langle \ell\widetilde{ii}|\rangle - \alpha U\langle ii|\rangle + t_{i\ell}\langle \ell\ell|\rangle + \Sigma' t_{in}\langle \ell n|\rangle,$$

$$(12)\quad (\omega - U)\langle \ell\widetilde{ii}|\rangle = -\alpha\gamma U\langle ii|\rangle + \alpha^2\gamma U\langle i|\rangle + \gamma t_{i\ell}\langle \ell\ell|\rangle + \gamma\sum_{n(\neq\ell)}' t_{in}\langle \ell n|\rangle + \alpha\sum_n t_{in}\langle in|\rangle + \alpha\gamma\sum_n t_{in}\langle n|\rangle.$$

次に$\langle i\ell i|\rangle$等に対する運動を追うが，再びここで次の略記号を導入して式を簡潔に表現する。

$$(13)\quad \langle i\ell\rangle = \langle c^{A+}_{i\downarrow} c^{B}_{\ell\downarrow}\rangle = \langle \ell i\rangle = \langle c^{B+}_{\ell\downarrow} c^{A}_{i\downarrow}\rangle,$$

$$(14)\quad \langle im\rangle = \langle c^{A+}_{i\downarrow} c^{A}_{m\downarrow}\rangle = \langle c^{A+}_{m\downarrow} c^{A}_{i\downarrow}\rangle = \langle mi\rangle.$$

ここで $\langle c^{B+}_{n\downarrow} c^{B}_{\ell\downarrow} c^{A}_{i\uparrow}\rangle$ $(n\neq\ell)$ 等3個の異る site の相関を含む項を無視し $\langle i\ell i|\rangle$等の運動を追う段階で出てくる $\langle n^{B}_{\ell\downarrow} c^{A}_{i\uparrow}|\rangle$ は $\rightarrow \alpha\langle i|\rangle$ と近似することにする。（SC，RBC の近似の精神と consistent である）この結果次の式を得る。

$$(15)\quad \omega\langle i\ell i|\rangle = \delta_{ii'}\langle i\ell\rangle + U\langle n_{\ell\uparrow} c^{+}_{i\downarrow} c_{\ell\downarrow} c_{i\uparrow}|\rangle + t_{\ell i}(\langle ii|\rangle - \sigma\langle i|\rangle) + \sum_{m(\neq i)}' t_{\ell m}\langle imi|\rangle,$$

$$(16)\quad (\omega - U)\langle \ell ii|\rangle = \delta_{ii'}\langle \ell i\rangle - U\langle n_{\ell\uparrow} c^{+}_{\ell\downarrow} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}|\rangle - t_{\ell i}(\langle ii|\rangle - \sigma\langle i|\rangle) - \sum_{m(\neq i)}' t_{\ell m}\langle mii|\rangle,$$

$$(17)\quad \omega\langle \ell i\ell|\rangle = U\langle c^{+}_{\ell\downarrow} n_{i\uparrow} c_{i\downarrow} c_{\ell\uparrow}|\rangle + t_{i\ell}(\langle \ell\ell|\rangle + \sigma\langle \ell|\rangle) + \sum_{n(\neq\ell)}' t_{in}\langle \ell n\ell|\rangle,$$

$$(18)\quad (\omega - U)\langle i\ell\ell|\rangle = -U\langle n_{i\uparrow} c^{+}_{i\downarrow} c_{\ell\downarrow} c_{\ell\uparrow}|\rangle - t_{i\ell}(\langle \ell\ell|\rangle + \sigma\langle \ell|\rangle) - \sum_{n(\neq\ell)}' t_{in}\langle n\ell\ell|\rangle.$$

容易に気が付くように(9)′式以来 $\sum'_{m(\neq i)}$ 等のように和に制限を加えたのは

例えば $\langle im|\rangle$ で $m=i$ と $m\neq i$ とでは Green 関数の hierarchy の段階が異り本質的に異る関数だからである。さて（15）～（18）で出てきた $\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{\ell\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle$ の運動を追う段階でかなり荒い近似を実行するが，それを次に実行する。

$$(19)\quad (\omega-U)\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{\ell\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle=\delta_{ii'}\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{\ell\downarrow}\rangle + \Sigma\, t_{\ell m}\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{m\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle-\Sigma\, t_{in}\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{n\downarrow}c_{\ell\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle$$

ここで $\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{\ell\downarrow}\rangle\cong\gamma\langle i\ell\rangle$

$$\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{m\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle\cong\gamma\langle imi|\rangle\qquad \langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{n\downarrow}c_{\ell\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle\cong\gamma\langle n\ell i|\rangle,$$

と decouple すると（19）は

$$(19)'\quad (\omega-U)\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{\ell\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle=\gamma\,\delta_{ii'}\langle i\ell\rangle + \gamma\, t_{\ell i}(\langle ii|\rangle-\sigma\langle i|\rangle)+\gamma\sum_{m(\neq i)}{}' t_{\ell m}\langle imi|\rangle,$$

同様にして，

$$(20)\quad \omega\langle n_{\ell\uparrow}c^{+}_{\ell\downarrow}c_{i\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle=\gamma\,\delta_{ii'}\langle \ell i\rangle - \gamma\, t_{\ell i}(\langle ii|\rangle-\sigma\langle i|\rangle)-\gamma\sum_{m(\neq i)}{}' t_{\ell m}\langle mii|\rangle,$$

$$(21)\quad (\omega-U)\langle c^{+}_{\ell\downarrow}n_{i\uparrow}c_{i\downarrow}c_{\ell\uparrow}|\rangle=\delta_{ii'}\langle c^{+}_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}c^{+}_{i\uparrow}c_{i\downarrow}\rangle + \alpha\, t_{i\ell}(\langle \ell\ell|\rangle+\sigma\langle \ell|\rangle)+\alpha\sum_{n(\neq \ell)}{}' t_{in}\langle \ell n\ell|\rangle,$$

$$(22)\quad \omega\langle n_{i\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}|\rangle=\delta_{ii'}\langle c^{+}_{i\uparrow}c^{+}_{i\downarrow}c_{\ell\downarrow}c_{\ell\uparrow}\rangle - \alpha\, t_{i\ell}(\langle \ell\ell|\rangle+\sigma\langle \ell|\rangle)-\alpha\sum_{n(\neq \ell)}{}' t_{in}\langle n\ell\ell|\rangle.$$

同じ site の相関を無視するという事が起ったが，これ以外の方法では compact にまとまらず，さし当りこの近似による結果をみることにする。ここで（10）′，（12）を（9）′，（11）へ（19）′～（22）を（15）～（18）へ代入

して整理すると次を得る。

$$(23)\quad <i\ell|> = \frac{1}{H}\Big\{-\gamma U(\omega-\gamma U)<\ell\ell|> + (\omega-\gamma U)\,t_{\ell i}<ii|> + \alpha\gamma^2U^2<\ell|> + (\omega-\gamma U)\sum_{m(\fallingdotseq i)}{}' t_{\ell m}<im|> + \gamma U\sum_m t_{\ell m}<\ell m|> + \alpha\gamma U\sum t_{\ell m}<m|>\Big\},$$

$$(24)\quad <\ell i|> = \frac{1}{H}\Big\{-\alpha U(\omega-\alpha U)<ii|> + (\omega-\alpha U)\,t_{i\ell}<\ell\ell|> + \alpha^2\gamma U^2<i|> + (\omega-\alpha U)\sum_{n(\fallingdotseq \ell)}{}' t_{in}<\ell n|> + \alpha U\sum_n t_{in}<in|> + \alpha\gamma U\sum_n t_{in}<n|>\Big\},$$

$$(25)\quad <i\ell i|> = \Big(\frac{\omega-\alpha U}{H}\Big)\Big\{\delta_{ii'}<i\ell> + t_{\ell i}(<ii|> - \sigma<i|>) + \sum_{m(\fallingdotseq i)}{}' t_{\ell m}<imi|>\Big\},$$

$$(26)\quad <\ell ii|> = \Big(\frac{\omega-\gamma U}{H}\Big)\Big\{\delta_{ii'}<\ell i> - t_{\ell i}(<ii|> - \sigma<i|>) - \sum_{m(\fallingdotseq i)}{}' t_{\ell m}<mii|>\Big\},$$

$$(27)\quad <\ell i\ell|> = \Big(\frac{\omega-\gamma U}{H}\Big)\Big\{t_{i\ell}(<\ell\ell|> + \sigma<\ell|>) + \sum_{n(\fallingdotseq \ell)}{}' t_{in}<\ell n\ell|>\Big\},$$

$$(28)\quad <i\ell\ell|> = -\Big(\frac{\omega-\alpha U}{H}\Big)\Big\{t_{i\ell}(<\ell\ell|> + \sigma<\ell|>) + \sum_{n(\fallingdotseq \ell)}{}' t_{in}<\ell n\ell|>\Big\}.$$

但し，

$$(29)\quad H = \omega(\omega-U)$$

とおいた。

(23)～(28)の右辺で例えば(23)の$<im|>$と左辺の$<i\ell|>$とは異質の関数であることは第一表を参照すれば直ちに理解できるが，これは明らかに sublattice に分割して反強磁性的状態を意識して抽出しているために残る項である。これら新しい Green 関数$<im|>$，$<\ell n|>$，$<imi|>$，$<mii|>$，$<\ell n\ell|>$及び$<n\ell\ell|>$の6項に対する運動方程式を立てると

Appendix A でこれを実行したが，この近似で閉じた式を得る。Appendix A の結果を（23）〜（28）に代入して整理すると次のようになる。

$$(30)\qquad F^2=(\omega-\alpha U)(\omega-\gamma U),\ T_{\ell n}=\sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}t_{mn},\quad T_{im}=\sum_{n(\neq \ell)} t_{in}t_{nm},$$

とおいて，

$$(31)\qquad \langle i\ell|\rangle=\left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right)t_{\ell i}\langle ii|\rangle+\left(F/H\right)^2\sum_n T_{\ell n}\langle in|\rangle$$
$$+\frac{1}{H^2}\{-\gamma U(\omega-\gamma U)H\langle \ell\ell|\rangle+\alpha\gamma^2U^2H\langle \ell|\rangle$$
$$-\gamma UF^2\sum_m t_{\ell m}\langle mm|\rangle+\alpha\gamma U(\omega^2-\alpha U\omega-\gamma^2U^2)\sum_m t_{\ell m}\langle m|\rangle$$
$$+\gamma^2U(\omega-\gamma U)\sum_{mn} t_{\ell m}t_{mn}\langle n|\rangle\},$$

$$(32)\qquad \langle \ell i|\rangle=\left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right)t_{i\ell}\langle \ell\ell|\rangle+\left(F/H\right)^2\sum T_{im}\langle \ell m|\rangle$$
$$+\frac{1}{H^2}\{-\alpha U(\omega-\alpha U)H\langle ii|\rangle+\alpha^2\gamma U^2H\langle i|\rangle$$
$$-\alpha UF^2\sum_n t_{in}\langle nn|\rangle+\alpha\gamma U(\omega^2-\gamma U\omega-\alpha^2U^2)\sum_n t_{in}\langle n|\rangle$$
$$+\alpha^2U(\omega-\alpha U)\sum_{mn} t_{in}t_{nm}\langle m|\rangle\},$$

$$(33)\qquad \langle i\ell i|\rangle=\left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right)\left[\delta_{ii'}\langle i\ell\rangle+t_{\ell i}(\langle ii|\rangle-\sigma\langle i|\rangle)\right]$$
$$+\left(F/H\right)^2\sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}\langle im\rangle\delta_{ii'}+\left(F/H\right)^2\sum_n T_{\ell n}\langle ini|\rangle,$$

$$(34)\qquad \langle \ell ii|\rangle=\left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right)\left[\delta_{ii'}\langle \ell i\rangle-t_{\ell i}(\langle ii|\rangle-\sigma\langle i|\rangle)\right]$$
$$-\left(F/H\right)^2\sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}\langle mi\rangle\delta_{ii'}+\left(F/H\right)^2\sum_n T_{\ell n}\langle nii|\rangle,$$

$$(35)\qquad \langle \ell i\ell|\rangle=\left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right)t_{i\ell}\left[\langle \ell\ell|\rangle+\sigma\langle \ell|\rangle\right]+\left(F/H\right)^2\sum_m T_{im}\langle \ell m\ell|\rangle,$$

$$(36)\qquad \langle i\ell\ell|\rangle=-\left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right)t_{i\ell}\left[\langle \ell\ell|\rangle+\sigma\langle \ell|\rangle\right]+\left(F/H\right)^2\sum_m T_{im}\langle m\ell\ell|\rangle.$$

さて（30）式の定義において $T_{\ell n}=\sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}t_{mn}$ の $m(\neq i)$ の制限を取り除いて格子の和についてたたみ込みの形に書くことにする。このため（31），（32）式の右辺の｛…｝の部分を全て残しておくと項の数え過ぎになる。し

かも (31), (32) 式の右辺の {…} のある割合が数え過ぎていることを確めることが出来るが，正確にこの割合を評価できぬ以上，このままの形で残しておくのは危険であるし，数段の複雑さを増すことも確められるためこの項をおとす。すると解くべき式は次のようになる。

(31)′ $\langle i\ell|\rangle = \left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right) t_{\ell i}\langle ii|\rangle + (F/H)^2 \sum_{mn} t_{\ell m} t_{mn}\langle in|\rangle,$

(32)′ $\langle \ell i|\rangle = \left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right) t_{i\ell}\langle \ell\ell|\rangle + (F/H)^2 \sum_{nm} t_{in} t_{nm}\langle \ell m|\rangle,$

(33)′ $\langle i\ell i|\rangle = \left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right)\left[\delta_{ii'}\langle i\ell\rangle + t_{\ell i}(\langle ii|\rangle - \sigma\langle i|\rangle)\right]$

$+ (F/H)^2 \sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}\langle im\rangle\delta_{ii'} + (F/H)^2 \sum_{mn} t_{\ell m} t_{mn}\langle ini|\rangle,$

(34)′ $\langle \ell ii|\rangle = \left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right)\left[\delta_{ii'}\langle \ell i\rangle - t_{\ell i}(\langle ii|\rangle - \sigma\langle i|\rangle)\right]$

$- (F/H)^2 \sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}\langle mi\rangle\delta_{ii'} + (F/H)^2 \sum t_{\ell m} t_{mn}\langle nii|\rangle,$

(35)′ $\langle \ell i\ell|\rangle = \left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right) t_{i\ell}\left[\langle \ell\ell|\rangle + \sigma\langle \ell|\rangle\right]$

$+ (F/H)^2 \sum_{nm} t_{in} t_{nm}\langle \ell m\ell|\rangle,$

(36)′ $\langle i\ell\ell|\rangle = -\left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right) t_{i\ell}\left[\langle \ell\ell|\rangle + \sigma\langle \ell|\rangle\right]$

$+ (F/H)^2 \sum t_{in} t_{nm}\langle m\ell\ell|\rangle.$

(31)′ ~ (36)′ は

(37) $\mathcal{G}_{\ell n} = \frac{1}{N}\sum_{\underset{\sim}{k}} \frac{e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{R}_{\ell n}}}{(H/F)^2 - \varepsilon_k^2},$

(38) $\mathcal{G}_{im} = \frac{1}{N}\sum_{\underset{\sim}{k}} \frac{e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{R}_{im}}}{(H/F)^2 - \varepsilon_k^2},$

但し，$\varepsilon_k = \sum_\ell t_{i\ell}\, e^{ikR_{i\ell}},$

なる $\mathcal{G}$ を導入すると HⅢ と同じような方法で解くことが出来ることは Appendix B に示したので，その結果を用いると次のようにまとまる。

(39) $\langle i\ell|\rangle=\left(\frac{H}{\omega-\alpha U}\right)\sum_n \mathcal{G}_{\ell n}t_{ni}\langle ii|\rangle,$

(40) $\langle \ell i|\rangle=\left(\frac{H}{\omega-\gamma U}\right)\sum_m \mathcal{G}_{im}t_{m\ell}\langle \ell\ell|\rangle,$

(41) $\langle i\ell i|\rangle=\left(\frac{H}{\omega-\gamma U}\right)\sum \mathcal{G}_{\ell n}t_{ni}[\langle ii|\rangle-\sigma\langle i|\rangle]$

$+\ \delta_{ii'}\sum_n \mathcal{G}_{\ell n}\{\left(\frac{H}{\omega-\gamma U}\right)\langle in\rangle+\sum_{m(\neq i)}t_{nm}\langle im\rangle\},$

(42) $\langle \ell ii|\rangle=-\left(\frac{H}{\omega-\alpha U}\right)\sum \mathcal{G}_{\ell n}t_{ni}[\langle ii|\rangle-\sigma\langle i|\rangle]$

$+\ \delta_{ii'}\sum_n \mathcal{G}_{\ell n}\{\left(\frac{H}{\omega-\alpha U}\right)\langle ni\rangle-\sum_{m(\neq i)}t_{nm}\langle mi\rangle\},$

(43) $\langle \ell i\ell|\rangle=\left(\frac{H}{\omega-\alpha U}\right)\sum \mathcal{G}_{im}t_{m\ell}[\langle \ell\ell|\rangle+\sigma\langle \ell|\rangle],$

(44) $\langle i\ell\ell|\rangle=-\left(\frac{H}{\omega-\gamma U}\right)\sum \mathcal{G}_{im}t_{m\ell}[\langle \ell\ell|\rangle+\sigma\langle \ell|\rangle].$

(39) ～ (44) を (7)′，(8)′ に代入すること

(45) $\Omega_1=\left(\frac{H}{\omega-\alpha U}\right)\sum t_{i\ell}\mathcal{G}_{\ell n}t_{ni},\quad \Omega_2=\left(\frac{H}{\omega-\gamma U}\right)\sum t_{i\ell}\mathcal{G}_{\ell n}t_{ni},$

(46) $\Omega_A=2\Omega_1+\Omega_2,\quad \Omega_B=2\Omega_2+\Omega_1,$

とおいて整理して次の様になる。

(47) $(\omega-\alpha U-\Omega_A)\langle ii|\rangle=[\alpha\gamma U-\sigma(\Omega_1+\Omega_2)]\langle i|\rangle$

$+\delta ii'\sum_{i\ell}t_{i\ell}\mathcal{G}_{i\ell}\{2\sum_{m\neq i}t_{nm}\langle mi\rangle-\frac{\sigma UH}{F^2}\langle ni\rangle\}$

(48) $(\omega-\gamma U-\Omega_B)\langle \ell\ell|\rangle=[\alpha\gamma U+\sigma(\Omega_1+\Omega_2)]\langle \ell|\rangle.$

ここで (47) 式の右辺の第 2 項を検討してみよう。まづ，

$$\sum_{\ell nm(\neq i)}t_{i\ell}\mathcal{G}_{\ell n}t_{nm}\langle mi\rangle=\sum_{\ell nm}t_{i\ell}\mathcal{G}_{\ell n}t_{nm}\langle c^{A+}_{m\downarrow}c^{A}_{i\downarrow}\rangle-\gamma\sum t_{i\ell}\mathcal{G}_{\ell n}t_{ni}$$

$$=\int d\varepsilon_k\rho(\varepsilon_k)\varepsilon_k^2[\langle n^A_{k\downarrow}\rangle-\gamma]\mathcal{G}(\varepsilon_k,\omega),$$

と表わせる。ここで $\rho(\epsilon_k)$ は U＝0 のときの tight binding な band の状態密度である。 $\mathcal{G}(\epsilon_k)$ は

$$\mathcal{G}(\epsilon_k, \omega) = \frac{1}{(H/F)^2 - \epsilon_k^2},$$

で与えられる $\mathcal{G}_{\ell n}$ の Fourier 変換である。次に

$$\sigma U \Sigma t_{i\ell} \mathcal{G}_{\ell n} \langle ni \rangle = \sigma U \int d\epsilon_k \rho(\epsilon_k) \cdot \mathcal{G}(\epsilon_k, \omega) \cdot \langle c^{B+}_{k\downarrow} c^{A}_{k\downarrow} \rangle$$

と表わす。paramagnetic な場合は $\sigma = 0$ だからこの量は零となる。

$u \gg |t_{ij}|$ のときは

$$O(\langle n^A_{k\downarrow} \rangle - \gamma) = O(e^{-U/2T}),$$

のオーダーであり，温度 T が U に比べて小さいときは無視できる。一般の場合に無視出来るとは勿論言えないが，今 (47) の右辺第二項を無視してみよう。すると結果は compact にまとまって

$$(47)' \quad (\omega - \alpha U - \Omega_A) \langle ii| \rangle = (\alpha \gamma U - \sigma(\Omega_1 + \Omega_2)) \langle i| \rangle,$$

$$(48)' \quad (\omega - \gamma U - \Omega_B) \langle \ell\ell| \rangle = (\alpha \gamma U + \sigma(\Omega_1 + \Omega_2)) \langle \ell| \rangle,$$

$$(45)' \quad \Omega_1 = \sum_{\ell n} t_{i\ell} \left(\frac{H}{\omega - \alpha U}\right) \mathcal{G}_{\ell n} t_{ni}, \quad \Omega_2 = \Sigma t_{i\ell} \left(\frac{H}{\omega - \gamma U}\right) \mathcal{G}_{\ell n} t_{ni},$$

$$(46)' \quad \Omega_A = 2\Omega_1 + \Omega_2, \quad \Omega_B = 2\Omega_2 + \Omega_1,$$

ここで (45)′ において $\left(\frac{H}{\omega - \alpha U}\right) \mathcal{G}_{\ell n}$ を今から求めるべき Green 関数 $\langle\langle c^B_{\ell\uparrow} ; c^{B+}_{n\uparrow} \rangle\rangle_\omega \equiv G^{\uparrow}_{\ell n}(\omega)$ であるという拡張を行う。A，B と ↑，↓ を同時に入れ換えると系は不変であるから (この事は (46) で既に用いている) (47)′，(48)′ を (5)′，(6)′ に代入すれば self-consistent に解くべき方程式を得る。即ち Fourier 変換して Bloch 表示に移ると

$$(49) \quad \langle A\uparrow| \rangle \equiv \langle\langle c^A_{k\uparrow} ; c^{A+}_{k\uparrow} \rangle\rangle_\omega,$$

$$\langle B| \rangle \equiv \langle\langle c^B_{k\uparrow} ; c^{A+}_{k\uparrow} \rangle\rangle = \langle\langle c^B_{k\downarrow} ; c^{A+}_{k\downarrow} \rangle\rangle,$$

(50) $\langle A\downarrow | \gg \equiv \ll c^{A}_{k\downarrow}\,;\, c^{A+}_{k\downarrow} \gg_{\omega}$,

とおくと，

(51)
$$\begin{bmatrix} (\omega-\gamma U)(\omega-\alpha U-\Omega_A)-\alpha\gamma U^2+\sigma U(\Omega_1+\Omega_2), & \varepsilon_k(\omega-\alpha U-\Omega_A) \\ -\varepsilon_k(\omega-\gamma U-\Omega_B), & (\omega-\alpha U)(\omega-\gamma U-\Omega_B)-\alpha\gamma U^2-\sigma U(\Omega_1+\Omega_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle A\uparrow | \rangle \\ \langle B | \ \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega-\alpha U-\Omega_A \\ 0 \end{bmatrix},$$

(52)
$$\begin{bmatrix} (\omega-\alpha U)(\omega-\gamma U-\Omega_B)-\alpha\gamma U^2-\sigma U(\Omega_1+\Omega_2), & -\varepsilon_k(\omega-\gamma U-\Omega_B) \\ -\varepsilon_k(\omega-\alpha U-\Omega_A), & (\omega-\gamma U)(\omega-\alpha U-\Omega_A)-\alpha\gamma U^2+\sigma U(\Omega_1+\Omega_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle A\downarrow | \gg \\ \langle B | \ \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega-\gamma U-\Omega_B \\ 0 \end{bmatrix},$$

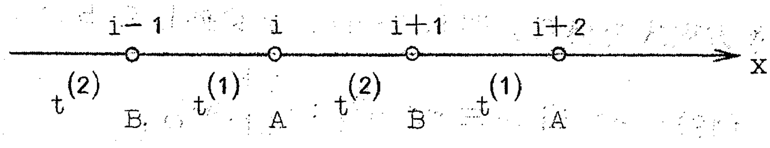
(53) $\Omega_1 = \sum_{im} t_{\ell i}\, G^{\downarrow}_{im}\, t_{m\ell}$, $\Omega_2 = \sum_{im} t_{\ell i}\, G^{\uparrow}_{im}\, t_{m\ell}$,

(54) $\Omega_A = 2\Omega_1 + \Omega_2$, $\Omega_B = 2\Omega_2 + \Omega_1$.

但し，$G^{\sigma}_{im} \equiv \ll c^{A}_{i\sigma}\,;\, c^{A+}_{m\sigma} \gg_{\omega}$ とおいた。

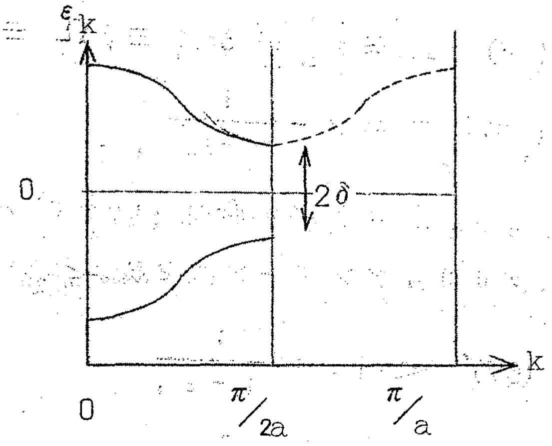
§3. Self-consistent な解，（数値計算）

具体的計算に入る前に§1で述べた Bond-alternation を入れる事を考慮する。先づ一次元の場合は第2図に示し

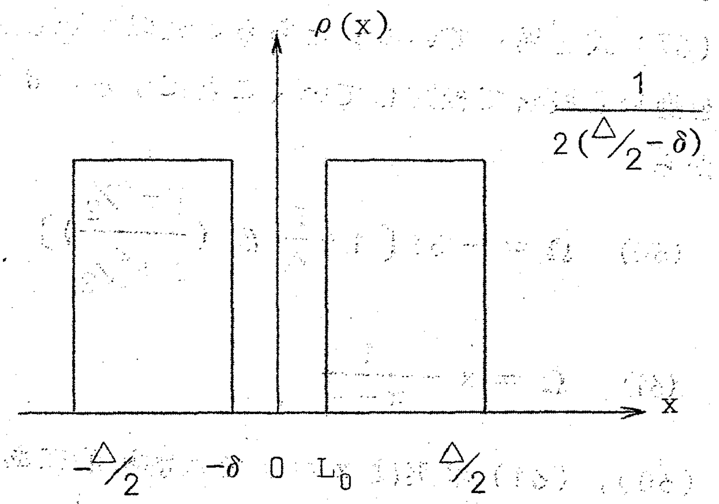


第 2 図

たように交互に transfer t_{ij} の大きさが変っているとする。今 $|t^{(1)}| > |t^{(2)}|$ とし，$\delta = |t^{(1)}| - |t^{(2)}|$ とおくと第2図のように格子点をやはり A, B sublattice に分けることが出来て A-sublattice では正の方向の $|t_{ij}|$ が大きく負の方向では小さい。B-sublattice からみるとこの逆である。$t_{ij} = t \pm \delta$ とおくと t_{ij} の Fourier 変換は i が A に属するか B のものかによって $\varepsilon_k = 2t\cos k.a \pm i\delta\sin ka$ となる。（a：格子定数）。明らかに Green 関数には $\varepsilon_k \cdot \varepsilon_k^*$ の形でのみ入ってくるから $\omega^2 - |\varepsilon_k|^2 = 0$ の根は容易に解るように 2δ の Gap を持った絶縁体となる。（第3図）この事は3次元にも容易に拡張できることが例えば単純立方格子の場合に証明できて，このとき $\varepsilon_k\varepsilon_k^* = (2t)^2[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a]^2 + \delta^2[\sin k_x a + \sin k_y a + \sin k_z a]^2$ となる。状態密度に発散がなければその細かい形の違いは本質的でない事が後の数値計算で確められるため bond alternation の効果は gap を持つ状態密度を導入してとり入れることが出来る。以下の計算では $\delta = 0$ も含めて第4図の形の状態密度を仮定する。これで band の状態密度が定義できたためいよいよ（51）～（54）を解くことを実行する。先づ paramagnetic な場合から考えてみよう。



第 3 図



第 4 図

1） paramagnetic solution

以降の計算ではエネルギー

の原点を $U/2$ に移し，単位を $U/2$ で scale して議論を進める。即ち，

(55) $(\omega - U/2)\dfrac{2}{U} \equiv x$,

(56) $\pm\sqrt{|\varepsilon_k|^2} \cdot \dfrac{2}{U} \equiv \varepsilon$,

と表わす。(51)～(54) から容易に

(57) $\langle A| \rangle \equiv \langle A\uparrow| \rangle \equiv \langle A\downarrow| \gg = \dfrac{F}{F^2-\varepsilon^2}$,

(58) $\Omega_A \equiv \Omega_B \equiv 3\Omega_1 \equiv 3\Omega_2 \equiv \Omega \equiv 3\int d\varepsilon\rho(\varepsilon)\varepsilon^2 \langle A| \rangle$,

(59) $F = x - \dfrac{1}{x-\Omega}$,

を得る。$\delta = 0$ の場合は (57) は A, B, sublattice に分けた意味を失うためブリリュアンゾーンは2倍に拡がって

(57)′ $\langle A| \rangle = \dfrac{1}{F-\varepsilon}$,

(59)′ $F = x - \dfrac{1}{x-\Omega}$,

となる。(57)′，(59)′ は実は HⅢ の (58)，(65)，(66) 式と全く同一のものである。違いは self-consistent な条件式 (58) が HⅢ の (60)，(67) 式と異っている。どちらの近似か正しいかは直ちには決め難いが，計算を進める段階で検討していくことにする。$\delta = 0$ の場合 (58)，(57)′，(59)′ から

(60) $\Omega = -3F\left[1+\dfrac{F}{\triangle}\ell n\left(\dfrac{F-\triangle/2}{F+\triangle/2}\right)\right]$,

(61) $\Omega = x - \dfrac{1}{x-F}$,

(60)，(61) は実は $x = 0$ では解析的にある程度の議論が行えるためそれを実行する。先づ (58)，(57)′，(59)′ から band が対称であれば $\Omega(x) = \Omega'(x) - i\Omega''(x)$ とおいたとき $\Omega'(-x) = -\Omega'(x)$，$\Omega''(-x) = \Omega''(x)$，従って $F(x) = F'(x) + iF''(x)$ とおいて $F'(-x) = -F'(x)$，$F''(-x) =$

$F''(x)$ なることが確められる。このことから $F'(0)=0$, $\Omega'(0)=0$ とおけるから $\Omega(0)=-iY$ とおいて $x=0$ で (60) 式を書き直すと

$$-iY=-\frac{3i}{Y}\left[1+\frac{i}{Y\Delta}\ln\left(\frac{i/Y-\Delta/2}{i/Y+\Delta/2}\right)\right],$$

$$Y^2/3=1-\frac{2}{Y\Delta}\tan^{-1}\left(\frac{Y\Delta}{2}\right).$$

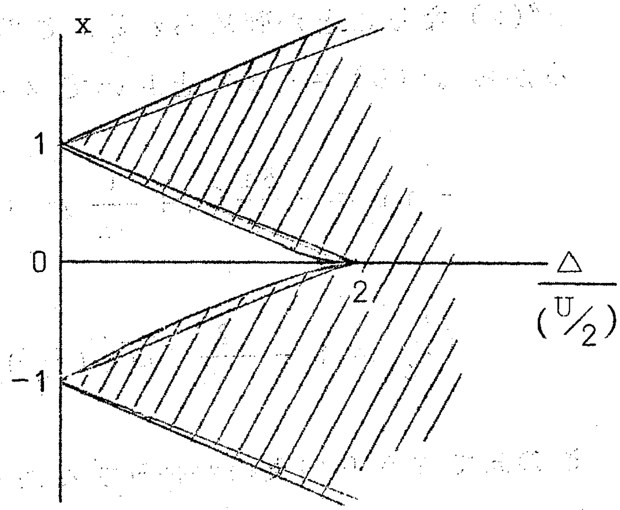
この式で $Y\neq 0$ の実根が存在する条件を求めてみよう。それにはYについて展開してみればよい。Y^4 の項まで展開すると

$$Y^2/3\left\{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2Y^2-\left[\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2-1\right]\right\}=0,$$

となり，$\Delta>2$ で $Y\neq 0$ の根が存在する。このことは $\Delta>2\ (=U)$ の band 巾では Fermi 面での状態密度が有限になる。即ち金属一絶縁体間の転移を示すを顕証している。HⅢ でここでの状態密度を用いると転移の band 巾は同様に $\Delta_c=2$ となる結果を得る。

さて (60)，(61) の複素超越方程式が一般に唯一解を持つか否かは解析的には確められないが，対数の branch を物理的な sheet にのみ限って実際数値計算により値を図示してみると唯一解のみ存在するらしいことが確められた。適当な初期値を与えて iteration によって解かせても物理的に妥当な値以外の解に到達した事は未だ一度もないし，こうして得た解を用いて sum rule 即ち粒子数の平均値を計算するとほぼ要求した精度の範囲でこの sum rule を満たしていることから他に解が存在するとは考えられない。具体的にその結果を第5図，第6図に示した。第5図は横軸に band 巾をとり縦軸にエネルギーをとって状態密度が有限に存在する領域を示した。特徴的な事はこれまでの例[3),11)]と異り絶縁体側で band 巾が広がることである。第6図にはいくつかの band 巾を与えたときの状態密度を表したものである。bond alternation を考え第4図のような状態密度を仮定しても δ が小さいときは第5図，第6図の様子は本質的には変らないので図示は省略する。又 HⅢ と同様に楕円形の状

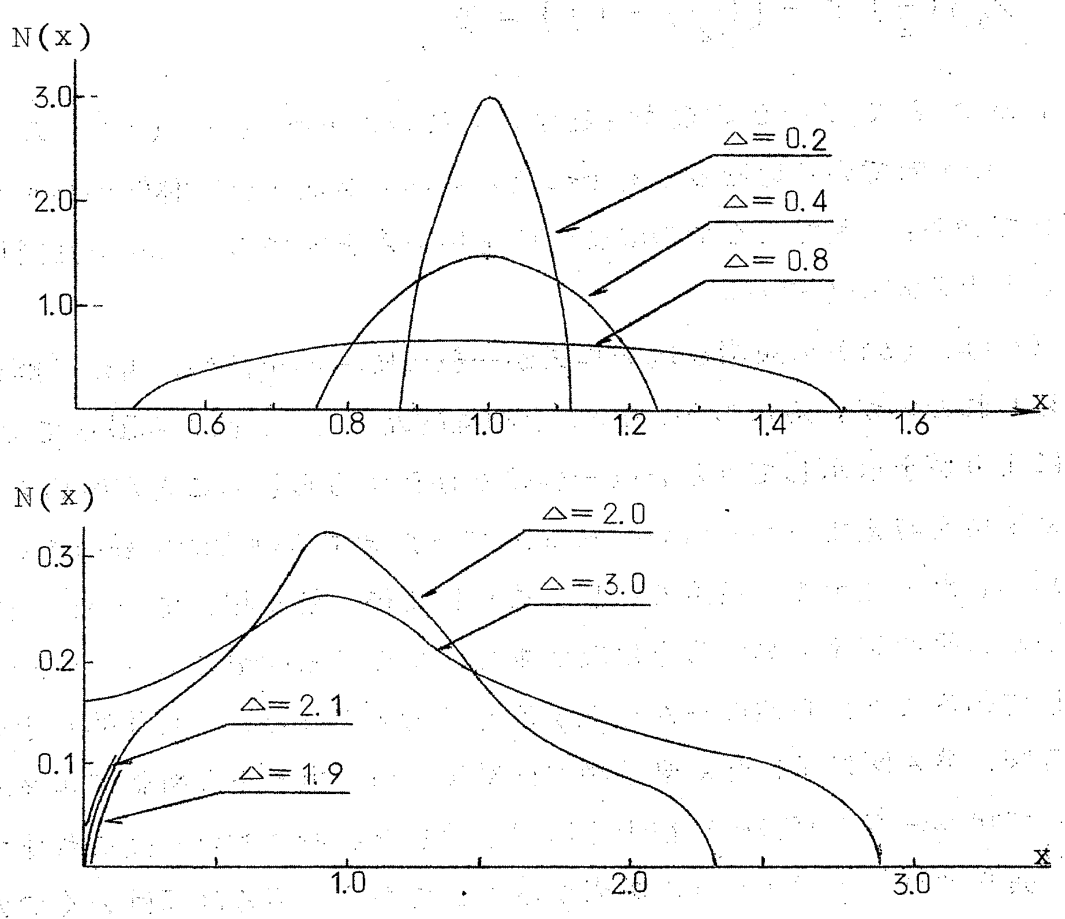
態密度を用いて計算すると結果は第５，６図と類似の図が得られるため，状態密度の細かい構造には本質的な構造は依存しない事が解った。



第　5　図

2　antiferromagnetic solution

反強磁性的状態が存在しうるか否かはその解が存在して常磁性的状態に比べてエネルギーを下げう



第　6　図

るか否かを調べなければならない。先づ解を求めることにする。(51)～(54)式から次の式が導かれる。

$$(62)\quad \langle A\uparrow| \rangle = \frac{x-\sigma-(1-\sigma^2+2\sigma\bar{\Omega})/(x+\sigma-\Omega_B)}{F_\sigma^2-\varepsilon^2}$$

$$(63)\quad \langle A\downarrow| \gg = \frac{x+\sigma-(1-\sigma^2-2\sigma\bar{\Omega})/(x-\sigma-\Omega_A)}{F_\sigma^2-\varepsilon^2}$$

$$(64)\quad \bar{\Omega} = \Omega_1+\Omega_2 = (\Omega_A+\Omega_B)/3,\quad \Omega_A = 2\Omega_1+\Omega_2,$$
$$\Omega_B = 2\Omega_2+\Omega_1,$$

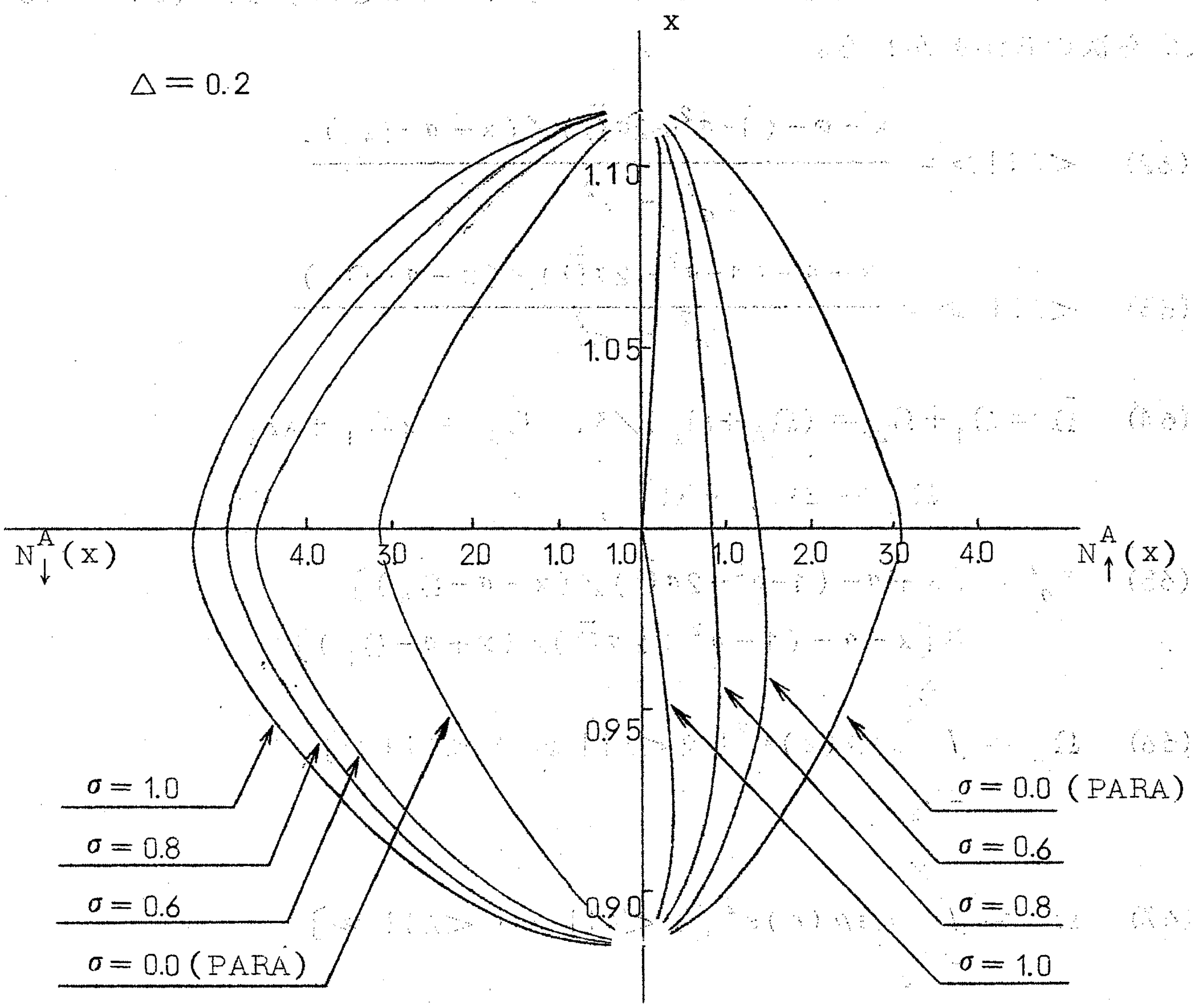
$$(65)\quad F_\sigma^2 = [x+\sigma-(1-\sigma^2-2\sigma\bar{\Omega})/(x-\sigma-\Omega_A)] \times [x-\sigma-(1-\sigma^2+2\sigma\bar{\Omega})/(x+\sigma-\Omega_B)],$$

$$(66)\quad \Omega_A = \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon\rho(\varepsilon)\varepsilon^2[2\langle A\downarrow|\gg + \langle A\uparrow|\rangle],$$

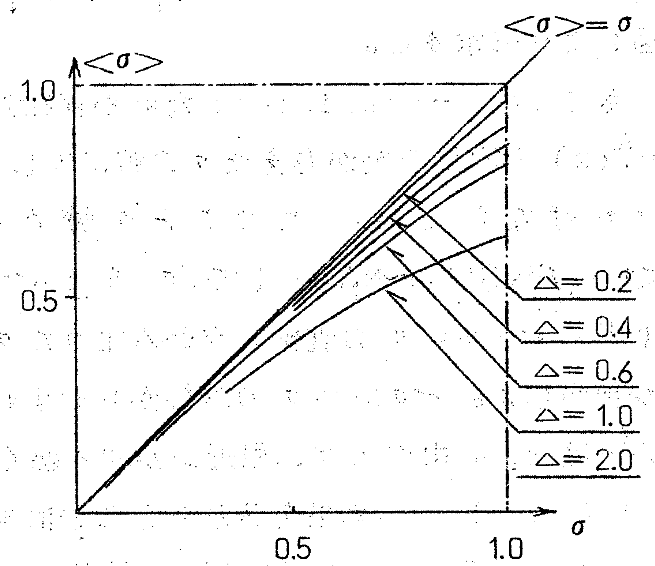
$$(67)\quad \Omega_B = \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon\rho(\varepsilon)\varepsilon^2[2\langle A\uparrow|\rangle + \langle A\downarrow|\gg].$$

(62)～(67)の連立複素超越方程式を先づσの値を与えて解いてみると確かにその解は得られて状態密度$N_\uparrow^A(x)$, $N_\downarrow^A(x)$は，例えば$\Delta=0.2$の場合第7図のように求まる。

さて self-consistent な解が存在するためには第7図の$N_\downarrow^A(x)$と$N_\uparrow^A(x)$の面積の差が与えたσの値に等しくなるようなσが絶対零度で存在しなければならない。このことを確めるためにσを横軸にとり縦軸に$\langle\sigma\rangle=\int dx[N_\downarrow^A(x)-N_\uparrow^A(x)]$として$\langle\sigma\rangle$をとったのが第8図である。図から明らかなように$\langle\sigma\rangle=\sigma$の直線と交わるような$\sigma$の値はどうしても存在し得ないことが判明した。$\langle\sigma\rangle=\sigma$の直線からのずれは band 巾$\Delta$が大きい程著しく，この事は band 巾が大きい程近似が増々悪くなっている事を意味する。bond alternation の効果を入れるとこの直線からのはずれは増々大きくなるという結果を得る。この結果は反強磁性的状態を議論するためには HIII の近似は本



第７図．　反強磁性の状態密度



第　8　図

質的に欠陥があるという事である。

§4.　結　論

Hubbard model の反強磁性的状態を想定して１体の Green 関数に対する方程式をたて，高次の hierarchy を追求し，高次の段階でＲＰＡ的 deconpling を行って self－consis－

stent な方程式を得た。これは連立又は単個の複素超越方程式であるが，その解は存在するが結局反強磁性的状態は得ることが出来なかった。然し常磁性の極限をとった解から Hubbard と同様に金属絶縁体転移が全く類似の形で求まった。Hubbard のものと self-consistency の条件が異るが band 巾が小さいとき Hubbard model が site 当り電子1個の場合には，反強磁性的基底状態にあると考えるのが妥当と思われるので，この条件については彼我の是非は何とも言い難いと思う。

bond alternation の効果を考えたのは初めから band の第1 Brillouin zone を体積が半分になってしまい HIII での元の第1 Brillouin zone を全て占拠した1価の絶縁体という観測されていない不明確な Fermi 面の困難が避けられると考えたからである。それについてここで思い切った想像をするならば純粋に Academic な興味の対象としての Hubbard model は別として，実在の coulomb 相関の強い物質では bond alternation を起して電子系のエネルギーを $-C\delta$ $(C>0)$ だけ得をして格子が歪んだための弾性エネルギー，$B\delta^2/2$ の損失とかね合った平衡点で安定な系を構成しているのではないかという事である。Adler，Brooks[10] の議論と異り coulomb 相関エネルギーが重要な役割を演じてからんでくると考える訳である。順序が逆になったがこの相関をハートレーホック近似で考慮に入れることは現在計算中であり，別の機会に述べる。

最後にこの仕事を進めるに当り基研の小額計算費の援助を受け，九大，及び東大計算センターの計算機を使用させていただいたことに感謝します。又，有益な助言をして下さった森先生，中嶋先生，都築先生，福山，黒田，栗原及び九大理研究室の皆さんに感謝します。数値計算を手伝って下さった末包嬢，原稿作成を担当して下さった久保嬢に謝意を表します。

Appendix A

(23) ～ (28) で出現した hierarchy の最も高い段階の Green 関数 $\langle im| \rangle$，$\langle \ell n| \rangle$，$\langle imi| \rangle$，$\langle mii| \rangle$，$\langle \ell n\ell| \rangle$，$\langle n\ell\ell| \rangle$ についてその運動を調べる。

先づ $\langle im| \rangle$ については

$$(\mathrm{A1})\quad \omega\langle n_{i\downarrow}c_{m\uparrow}|\rangle=\gamma\delta_{mi'}+U\langle n_{i\downarrow}n_{m\downarrow}c_{m\uparrow}|\rangle+\Sigma\, t_{mn}\langle n_{i\downarrow}c_{n\uparrow}|\rangle,$$

$$(\mathrm{A2})\quad \omega\langle m|\rangle=\delta_{mi'}+U\langle n_{m\downarrow}c_{n\uparrow}|\rangle+\Sigma\, t_{mn}\langle n|\rangle.$$

(A1) ～ (A2) × γ より

$$(\mathrm{A1})'\quad \omega\langle im|\rangle=U\langle \widetilde{imm}|\rangle-\gamma U\langle mm|\rangle+\sum_n t_{mn}\langle in|\rangle,$$

$$(\mathrm{A3})\quad \omega\langle n_{i\downarrow}n_{m\downarrow}c_{m\uparrow}|\rangle=\gamma^2\delta_{mi'}+U\langle n_{i\downarrow}n_{m\downarrow}c_{m\uparrow}|\rangle+\Sigma\, t_{mn}\langle n_{i\downarrow}n_{m\downarrow}c_{n\uparrow}|\rangle$$

$$\cong\gamma^2\delta_{mi'}+U\langle n_{i\downarrow}n_{m\downarrow}c_{m\uparrow}|\rangle+\gamma\,\Sigma\, t_{mn}\left[\langle n_{i\downarrow}c_{n\uparrow}|\rangle+\langle n_{m\downarrow}c_{n\uparrow}|\rangle\right]$$

(A3) ～ (A2) × γ^2 より

$$(\mathrm{A4})\quad (\omega-U)\langle\widetilde{imm}|\rangle=-\gamma^2U\langle mm|\rangle+\alpha\gamma^2U\langle m|\rangle+\gamma^2\sum_n t_{mn}\langle n|\rangle+\gamma\sum_n t_{mn}\left[\langle in|\rangle+\langle mn|\rangle\right].$$

(A1)′ に (A4) を代入して

$$(\mathrm{A5})\quad \langle im|\rangle=\frac{1}{H}\{-\gamma U(\omega-\alpha U)\langle mm|\rangle+\alpha\gamma^2U^2\langle m|\rangle+(\omega-\alpha U)\sum_n t_{mn}\langle in|\rangle+\gamma U\sum_n t_{mn}\langle mn|\rangle+\gamma^2U\Sigma\, t_{mn}\langle n|\rangle\}.$$

同様にして

$$(\mathrm{A6})\quad \langle \ell n|\rangle=\frac{1}{H}\{-\alpha U(\omega-\gamma U)\langle nn|\rangle+\alpha^2\gamma U^2\langle n|\rangle+(\omega-\gamma U)\sum_m t_{nm}\langle \ell m|\rangle+\alpha U\sum_m t_{nm}\langle nm|\rangle+\alpha^2U\sum_m t_{nm}\langle m|\rangle\}.$$

次に $\langle imi|\rangle$ について計算する。

$$(\mathrm{A7})\quad \omega\langle imi|\rangle=\delta_{ii'}\langle im\rangle+U\langle c^{+}_{i\downarrow}n_{m\uparrow}c_{m\downarrow}c_{i\uparrow}|\rangle+\Sigma\, t_{mn}\langle ini|\rangle,$$

(A8) $(\omega-U)\langle c_{i\downarrow}^{+} n_{m\uparrow} c_{m\downarrow} c_{i\uparrow} | \rangle = \delta_{ii'} \langle c_{i\downarrow}^{+} c_{m\downarrow} n_{m\uparrow} \rangle$

$$+ \Sigma\, t_{mn} \langle c_{i\downarrow}^{+} n_{m\uparrow} c_{n\downarrow} c_{i\uparrow} | \rangle$$

$$\cong \alpha \left[\delta_{ii'} \langle im \rangle + \Sigma\, t_{mn} \langle ini | \rangle \right].$$

(A8) を (A7) に代入して

(A9) $\langle imi | \rangle = \left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right) \left[\delta_{ii'} \langle im \rangle + \sum_{n} t_{mn} \langle ini | \rangle \right],$

を得るが同様にして

(A10) $\langle mii | \rangle = \left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right) \left[\delta_{ii'} \langle mi \rangle - \sum_{n} t_{mn} \langle nii | \rangle \right],$

(A11) $\langle \ell n \ell | \rangle = \left(\frac{\omega-\alpha U}{H}\right) \sum_{m} t_{nm} \langle \ell m \ell | \rangle,$

(A12) $\langle n \ell \ell | \rangle = -\left(\frac{\omega-\gamma U}{H}\right) \Sigma\, t_{nm} \langle m \ell \ell | \rangle.$

(A5), (A6), (A9) ~ (A12) を (23) ~ (28) に代入して (31) ~ (36) を得る。

Appendix B

(31)′ ~ (36)′ は

(B1) $X_\ell(i) = (F/H)^2 \left[Y_\ell(i) + \sum_{mn} t_{\ell m} t_{mn} X_n(i) \right],$

(B1)′ $X_i'(\ell) = (F/H)^2 \left[Y_i'(\ell) + \sum_{nm} t_{in} t_{nm} X_m'(\ell) \right],$

の形の方程式に書くことが出来る。

(31)′, (33)′, (34)′ は (B1) の形 (32)′, (35)′, (36)′ は (B2) の形となる。即ち, (31)′, (33)′, (34)′ については各

(B2) $X_\ell(i) = \langle i \ell \ell | \rangle, \qquad Y_\ell(i) = \left(\frac{H}{\omega-\alpha U}\right) t_{\ell i} \langle ii | \rangle,$

$$(B3)\begin{cases} X_\ell(i) = \langle i\ell i|\rangle, \\ Y_\ell(i) = \left(\dfrac{H}{\omega-\gamma U}\right)\left[\delta_{ii'}\langle i\ell\rangle + t_{\ell i}(\langle ii|\rangle - \sigma\langle i|\rangle)\right] \\ \qquad\qquad + \sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}\langle im\rangle \delta_{ii'} \quad , \end{cases}$$

$$(B4)\begin{cases} X_\ell(i) = \langle \ell ii|\rangle, \\ Y_\ell(i) = \left(\dfrac{H}{\omega-\alpha U}\right)\left[\delta_{ii'}\langle \ell i\rangle - t_{\ell i}(\langle ii|\rangle - \sigma\langle i|\rangle)\right] \\ \qquad\qquad - \sum_{m(\neq i)} t_{\ell m}\langle mi\rangle \delta_{ii'} \quad , \end{cases}$$

となり (32)′, (35)′, (36)′ については

$$(B5)\quad X_i'(\ell) = \langle \ell i|\rangle \quad , \qquad Y_i'(\ell) = \left(\frac{H}{\omega-\gamma U}\right) t_{i\ell}\langle \ell\ell|\rangle,$$

$$(B6)\begin{cases} X_i'(\ell) = \langle \ell i\ell|\rangle, \\ Y_i'(\ell) = \left(\dfrac{H}{\omega-\alpha U}\right) t_{i\ell}\left[\langle \ell\ell|\rangle + \sigma\langle \ell|\rangle\right], \end{cases}$$

$$(B7)\begin{cases} X_i'(\ell) = \langle i\ell\ell|\rangle, \\ Y_i'(\ell) = -\left(\dfrac{H}{\omega-\gamma U}\right) t_{i\ell}\left[\langle \ell\ell|\rangle + \sigma\langle \ell|\rangle\right]. \end{cases}$$

今次の関数を導入する。

$$(B8)\quad \mathcal{G}_{n'n} = \frac{1}{N}\Sigma_{\underset{\sim}{q}} \frac{e^{i\underset{\sim}{q}\cdot\underset{\sim}{R}_{n'n}}}{(H/F)^2 - \varepsilon_{\underset{\sim}{q}}^2},$$

$$(B8)'\quad \mathcal{G}_{m'm} = \frac{1}{N}\Sigma_{\underset{\sim}{q}} \frac{e^{i\underset{\sim}{q}\cdot\underset{\sim}{R}_{m'm}}}{(H/F)^2 - \varepsilon_{\underset{\sim}{q}}^2}.$$

(B8) × $t_{\ell m} t_{mn'}$ として m, n′ について和をとると

$$\sum_{mn'} t_{\ell m} t_{mn'} \mathcal{G}_{n'n} = \frac{1}{N}\Sigma_{\underset{\sim}{q}}\sum_{mn'} t_{\ell m} t_{mn'} \frac{e^{i\underset{\sim}{q}\cdot\underset{\sim}{R}_{n'n}}}{(H/F)^2 - \varepsilon_{\underset{\sim}{q}}^2},$$

$$= -\delta_{\ell n} + (H/F)^2 \mathcal{G}_{\ell n} .$$

上式を変形して

(B9) $$\mathcal{G}_{\ell n} = (F/H)^2 [\delta_{\ell n} + \sum_{mn'} t_{\ell m} t_{mn'} \mathcal{G}_{n' n}] .$$

(B9) × $Y_n(i)$ として n について和をとると

(B10) $$\sum_n \mathcal{G}_{\ell n} Y_n(i) = (F/H)^2 [Y_\ell(i) + \sum_{mn} t_{\ell m} t_{mn} \{\sum_{n'} \mathcal{G}_{nn'} Y_{n'}(i)\}] .$$

(B10) 式で $\sum_n \mathcal{G}_{\ell n} Y_n(i) = X_\ell(i)$ とおくと (B10) は明らかに (B1) と同値である。即ち (B1) の解は

(B11) $$X_\ell(i) = \sum_n \mathcal{G}_{\ell n} Y_n(i) ,$$

となり (B2) の解は同様に

(B12) $$X_i'(\ell) = \sum_m \mathcal{G}_{im} Y_m'(\ell) ,$$

と表わせる。HⅢ の解法との本質的違いは A, B sublattice に分けたために HⅢ の (30) 及び (A5) 式で表わされる self-consistent な条件が異ること である。(B11), (B12) に (B2) ~ (B7) を代入して整理すると (39) ~ (44) を得る。

参考文献

1) J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. A, 276 (1963), 238
2) J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. A. 285 (1964), 401
3) M.C.Gutzwiller, Phys. Rev. 134 (1964) 923,
M.C.Gutzwiller, Phys. Rev. 137 (1965) 1726,
D.R.Penn, Phys. Rev. 142 (1966) 350,
Y.Nagaoka, Phys. Rev. 147 (1966) 392 and L.M.Roth, Phys. Rev. 184 (1969) 451
4) E.M.Lieb and F.Y.Wu, Phys. Rev. Lett. 20 (1968) 1445

5) D.B.McWhan, T.M.Rice and J.P.Remeika, Phys. Rev. Lett. 23 (1969) 1384

6) T.A.Kaplan and P.N.Argyres, International Journ. Quantum Chem. 3 (1970) 851

7) M.Cyrot, Phys. Rev. Lett. 25 (1970) 871

8) W.F.Brinkman and T.M.Rice, preprint

9) C.Herring, Magnetism 4 Edited by G.T.Rado and H.Suhl, Academic press.

10) D.Adler and H.Brooks, Phys. Rev. 155 (1967) 826

11) A.B.Harris and R.V.Lauge, Phys. Rev. 157 (1967) 295

12) D.B.McWhan, T.M.Rice and J.P.Remeika. Phys. Rev. Lett. 23 (1969) 1384