参 考 文 献

1) M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. 137 (1965), A1726
2) W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B2 (1970), 4302
3) F. Takano and M. Uchinami, Prog. Theor. Phys. 53 (1975), 1267
4) T. Ogawa, K. Kanda and T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. 53 (1975), 614

菊池近似を利用した高次 Gutzwiller 近似

京大理 小 川 泰
神 田 邦 彦

Gutzwiller 近似[1] は Hartree−Fock 近似を含んで高めた変分法であり，運動量空間と座標空間を併用するので，弱結合及び強結合の両極限を連続的につないで扱える可能性が一つの魅力である。しかし計算遂行上の近似を必要とするために精神通りの変分法にはなっていない。我々はこの変分法を反強磁性問題に拡張しながら再定式化したが，[2] 格子統計の菊池近似[3] の利用によって計算遂行上の近似を系統的に改良できそうである。

Hubbard 模型に対して Hartree−Fock 近似のように単一の Slater 行列式で表わせる状態 $|\Phi\rangle$ を用意し，両スピン電子によって二重占拠された格子点一ケ毎に site 表示の波動関数を $\mathscr{g}$ 倍（$0<\mathscr{g}<1$ の定数）する演算子 $G(\mathscr{g})$ を定義して $|\Psi\rangle = G(\mathscr{g})|\Phi\rangle/\sqrt{\langle\Phi|G^2(\mathscr{g})|\Phi\rangle}$ を試行関数とする変分法が Gutzwiller の変分法である。エネルギー期待値の計算には $\langle\Phi|\prod_{i\in N} c_i^+ c_i \prod_{j\notin N} c_j c_j^+|\Phi\rangle$ のような量の評価が必要である。i, j は格子点で N は電子数 N に等しい数からなる格子点の集合であり，常磁性状態を考えているとき $|\Phi\rangle$ は Fermi 球状態である。Pauli 原理から判るようにこの量は L×L 行列の行列式で表わすことができる（L: 格子点数）。この行列を site 表示して対角要素の積 $n^N(1-n)^{L-N}$（$n=N/L$）だけで近似したものが Gutzwiller の行った近似に相当することは前論文[2]で示した。Pauli 原理による同一スピン電子間の空間的相関をとり入れて行列式の評価を行おうというのが今回の話の趣旨である。

一原子当り一電子の常磁性状態について弱結合と強結合の両極限の計算を行った。弱結合では，改良前よりもエネルギーが大きくなってしまう領域があるが，これは最低次の近似の方に問題があるのだと思われる。強結合では，Brinkman−Rice[4]が指摘したような，二重占拠格子点の消失が起るが，その臨界結合定数は最低次近似の場合よりも大きくなる。二重占拠点が皆無になるのは明らかに無限結合においてのみであり，有限結合でこれが起るのは物理的でない。これに関係したこの近似の欠陥は，いわゆる alloy analogy[5]の逆対比を利用して，この近似の考え方を不規則系問題に適用し，[6] CPA によるような二元合金の状態密度を求めたとき，成分状態密度が負になるようなことが起るという形でも現われる。

参考文献

1) M.C.Gutzwiller; Phys. Rev. 134 (1964), A923 他
2) T.Ogawa, K.Kanda and T.Matsubara; Prog. Theor. Phys. 53 (1975), 614
3) R.Kikuchi; Phys. Rev. 81 (1951), 988
4) W.F.Brinkman and T.M.Rice; Phys. Rev. B2 (1970), 4302
5) J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. A276 (1963), 236
6) T.Ogawa, T.Ogawa and T.Matsubara; Prog. Theor. Phys. 投稿中