

場合へのTI法の適用は本論文では触れない。主に周期ポテンシャルの大きさと粒子間の結合力の強さの比が異なる場合の計算を行い、その結果について議論する。

周期ポテンシャルの大きさの、粒子間の結合力の強さに対する比が、比較的大きな場合には超イオン導電体の問題があり、K.Takahashi, I.Mannari, T.Ishii らが、モンテカルロ・シミュレーション(MC)の方法で、精力的に計算を行っており、その結果との比較を行う。

ここで使用したTI方程式は、それ自体は厳密なものであるが、これを、解析的に解くことはできない(近似によるアプローチは様々な方法がある)。そこで、数値計算に頼る事になるのであるが、その方法には若干の問題が残されている。その一つは、本来無限区間の定積分である所を有限区間の離散的な和(台形公式)として処理している点にある。この点については、最後に触れる。今後の課題として、実際に計算するには至っていないが、幾つかの改良された方法の提案を行う。

3. 2次元3角格子の Spin density wave 状態

中西 知己

2次元電子形のSDW状態について、簡単なmodelを使って調べた。

ここではmodelとしてHubbard modelを用いている。これは電子間のCoulomb相互作用を同一格子点上のみに限定し、又格子点間にはある大きさのhoppingがあるという、固体のmodelとしては非常に簡単で基本的なものである。このmodelをもとにいくつかのspin density wave(SDW)状態について系のenergy, band構造を評価した。

正方格子では、half fillingについて、antiferro(AF)パターンが最も安定であることは既に確認されている。それに対して、3角格子においてAFパターンはフラストレーションを持つため、それほど低いenergyを持つことができない。このため、より複雑なSDW状態によってさらに低いenergyが実現され得る。これまでは、経験的に120度構造が最も安定であろうとされていたが、今回の計算でより多くのパターンを調べることによってこの予想をさらに裏付けること

ができた。

又、電子数が half filling よりもずれている場合、SDW 状態はいくつかの格子点で spin moment = 0 となるようなより複雑な形を取り得る。このようなパターンを一般に vortex lattice structure と呼ぶ。今回は特にこのようなパターンにおいて自発的に起こる charge density wave に注目して、系の energy, 安定性について考察を進めた。その結果、mid gap state および main gap という構造によって、これらを説明できることがわかった。

4. 強磁場中の 2 次元 Charge-density-wave 状態

横山 薫

2 次元電子系に垂直に、強磁場をかけると、電子は、charge-density-wave 状態を形成すると仮定する。charge-density-wave 状態とは、電荷密度が格子状に、静的に配列した状態である。この場合、電荷密度は、3 角格子を形成すると考える。

このような静的に配列する電荷密度をつくるため、まず、磁場中の電子が占める、Landau 準位の一番エネルギーの低い状態を考える。この状態に適切な係数をつけて、重ね合わせることにより、3 角格子を形成する電荷密度をつくるのである。この様な、重ね合わせをする段階で、order parameter が、定義される。これは、一番エネルギーの低い Landau 準位にある波動関数からつくられる電荷密度 $\rho(r)$ を Fourier 変換する段階で定義されるので、波数 Q に依存する。

この様に定義された電荷密度に対する Hamiltonian には、電子間の相互作用のみを考える。そして、その近似として、Hartree-Fock 近似をとる。この様な、相互作用 Hamiltonian には order parameter が、含まれている。また、order parameter は、その定義より、Hamiltonian からつくられる行列を対角化する時に得られる固有ベクトルから、計算される。従って、この間をつじつまの合うように計算して、order parameter を求める。

ところで、order parameter を計算する際に、これを支配する波数 Q は今までの計算では、ある基本的な波数よりも大きいも