

軌道自由度を持つ一次元ハバードモデルの電子状態

三重大 工学部 佐野和博¹
名古屋大学 理学部 大野義章

1 始めに

最近、軌道自由度を持つ強相関電子系が注目を集めている。軌道自由度があると、電子間のクーロン相互作用は複数のバンド間にさまざまな相互作用をもたらすことになるのでそこに現れる物理は興味深いものと思われる。ここでは以下のようなハミルトニアンで記述される一次元系のモデルを考える。

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{i,m,\sigma} t_m (c_{i,m,\sigma}^\dagger c_{i+1,m,\sigma} + h.c.) + U \sum_{i,m} n_{i,m,\uparrow} n_{i,m,\downarrow} + \Delta \sum_{i,\sigma} (n_{i,a,\sigma} - n_{i,b,\sigma}) \\
 & + U' \sum_{i,\sigma} n_{i,a,\sigma} n_{i,b,-\sigma} + (U - J) \sum_{i,\sigma} n_{i,a,\sigma} n_{i,b,\sigma} \\
 & - J \sum_{i,m,\sigma} (c_{i,a,\uparrow}^\dagger c_{i,a,\downarrow} c_{i,b,\downarrow}^\dagger c_{i,b,\uparrow} + h.c.) - J \sum_{i,m,\sigma} (c_{i,a,\uparrow}^\dagger c_{i,a,\downarrow}^\dagger c_{i,b,\uparrow} c_{i,b,\downarrow} + h.c.) \quad (1)
 \end{aligned}$$

ここで、 $m(m = a, b)$ は軌道の自由度をあらわすものとし、サイト上の相互作用として U は同一軌道内のクーロン斥力、 U' 、 J は、それぞれ異なる軌道間のクーロン斥力とフント結合をあらわす。電子のトランスファーは同一軌道間のみにあるものとして $t_a = t_b = 1$ とし、 U は U' と J の間に $U = U' + 2J$ なる関係があるものとする。軌道間のエネルギー準位の差は Δ で、電子のフィリング n は unit cell 当たりの電子数である。すでに上記のモデルとほぼ同等のものが DMRG などの数値的方法により、調べられているがそれらは主に強磁性状態に注目している [1,2]。ここではむしろ常磁性の領域に注目し特にそこで超伝導状態が存在するか否かに焦点を当てて電子状態を調べた。

2 計算手法と結果

上記のモデルハミルトニアンで表わされる有限系を数値的対角化法により調べる。使用したシステムは 6 ユニット中に 8 個の電子を持つ系である。システムサイズを変えたり電子数を変えたりしても計算してあるが、以下に述べる結果は定性的には変わらない。超伝導状態になっているかどうかの判定には、Luttinger 流体論を援用し Luttinger-liquid パラメータ K_ρ を数値的に求め、それが 1 を超えるかどうかで判定した。 Δ がゼロの場合は、すでに知られているように $U'/t - J/t$ なるパラメータ平面上で見ると U' と $J(U' \sim J$ とする) が大きな所では基底状態が強磁性 (complete

¹ E-mail:sano@phen.mie-u.ac.jp

ferro) となる領域がある [1]。今 Δ をバンド幅程度まで増やして行くと partial ferro の領域が生じ、それが常磁性の領域に張り出してくるようになる。

この時、常磁性領域で K_ρ を求めたところ partial ferro 相の手前で K_ρ の値が 1 を超え超伝導状態と考えられる領域が存在することがわかった (図 1:ここでは $U'/t = J/t$ となるライン上で見ている)。そこからさらに相互作用を強くすると基底状態は partial ferro 状態へとクロスする事になる。1次摂動近似で求めた K_ρ の値と比較した所、相互作用が弱い所で対角化の結果とほぼ一致しているので、サイズ依存性はあまり大きくないと推定される。図 2 に同じ系を、今度は U'/t と J/t を変えた時の相図を示す。この図からわかるように partial ferro の領域に隣接する形で超伝導の領域が見られる。

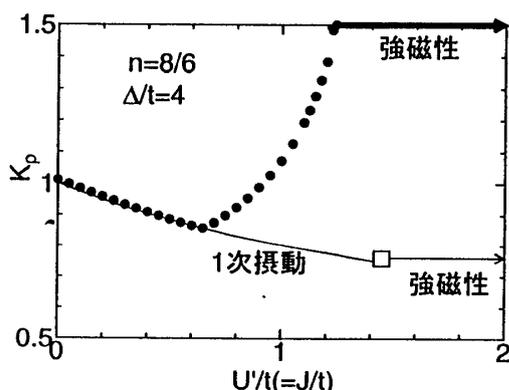


図 1: $U'/t(= J/t)$ の関数として見た K_ρ

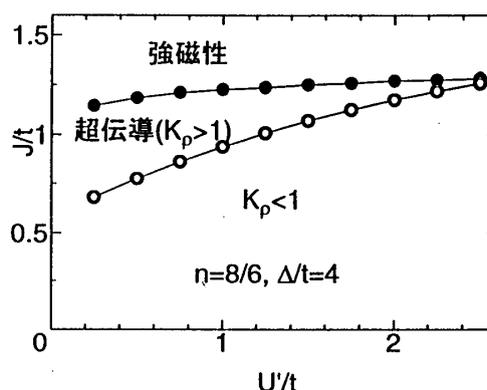


図 2: $U'/t - J/t$ 平面で見た相図

3 まとめと議論

2つの原子軌道を持つ一次元ハバードモデルの電子状態を数値的対角化法と Luttinger 流体論に基づき調べた。2つの原子軌道間に適度なエネルギー差があるとき、partial ferro 相の手前で超伝導状態と考えられる領域を見つける事が出来た。

この超伝導状態の領域は、現実的なパラメータ領域と考えられる $U'/t > J/t$ となる領域にも広がっているので、実際の物質においても強磁性相の近くに超伝導相が出現する事が期待できる。なお、この超伝導相は常磁性の領域にあるもので complete ferro 相内の $U'/t < J/t$ となる領域で期待される強磁性の超伝導相 [1] とはまったく異なるものである。

参考文献

- [1] H. Sakamoto, T. Momoi and K. Kubo, Phys. Rev. **B65** (2002), 224403
- [2] K. Kusakabe, S. Watanabe and Y. Kuramoto, J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002), 311