

無限次元ハバードモデルの量子相転移

鈴木 康夫 : NTT基礎研究所

斎藤慎一, 栗原 進 : 早稲田大学理工学部物理学科

ハバードモデルは強相関電子系を研究するにあたってもっとも基本的なモデルであり, 次のハミルトニアンで表される.

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

このような単純なモデルでも厳密な基底状態は1次元の場合しかわかっていない. このモデルでのパラメータは電子密度 $n = N/M$ と相互作用の強さ $u = U/\epsilon_0$ である. ここで N は電子数, M は格子点の数, ϵ_0 はバンドエネルギーで, 空間の次元を D とすると $2t\sqrt{D/\pi}$ で表せる.

我々は, 斥力および引力のハバードモデルの基底状態の候補として, 様々な対称性を破る可能性を取り入れた一般化したガッツビラー変分波動関数を用い, 高次元近似を利用してハバードモデルの基底状態を研究した. 基底状態は, 反強磁性相, フェルミ液体相, 超伝導相, 電荷密度波相, ブリンクマン・ライス型絶縁体相, 超固体相といった様々な相をとることが可能であることが示された. 相互作用および電子密度を変化させると, 基底状態はこれらの相の間を移り変わり, この変化は量子相転移と呼ばれる. 我々は移り変わる相の状態を統一的な波動関数で表すことにより量子相転移を記述することに成功した.

一般化したガッツビラー波動関数とは以下のようなものである.

$$\Psi = g^{\hat{d}} |\Psi_0\rangle \quad (2)$$

ここで g は変分パラメータ, $\hat{d} = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ は二重占有サイト数オペレータ, $|\Psi_0\rangle$ は平均場近似的基底状態である. $|\Psi_0\rangle$ としてフェルミ液体 (FL) 状態 $\prod_{k < k_F} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger |\text{vac}\rangle$ を取るとガッツビラー及びブリンクマン・ライ斯拉が扱った状態 [1] となり, g が0になることがFLからブリンクマン・ライス型絶縁体相 (B-R) への相転移を表す.

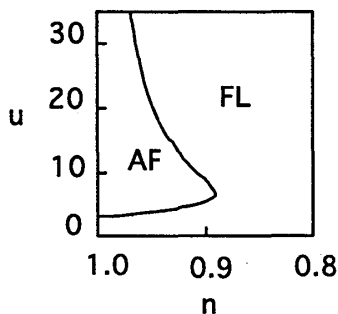
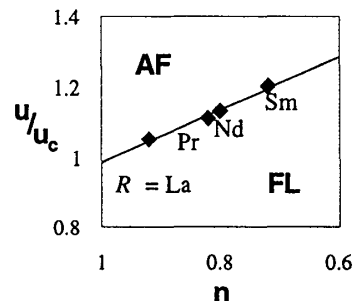


Figure 1: 斥力モデルの基底状態の相図

Figure 2: $R_{1-x}\text{Ca}_x\text{TiO}_{3+y/2}$ の反強磁性境界を示す相図

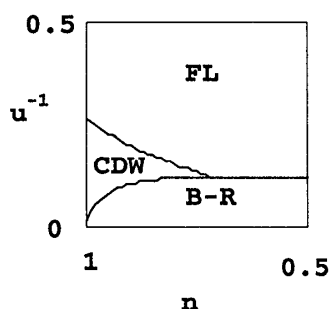


Figure 3: 引力モデルのノーマル相の相図

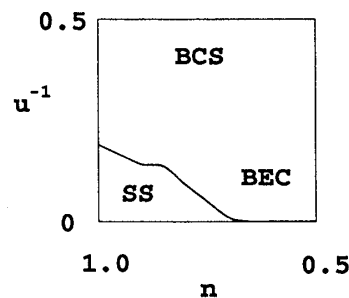


Figure 4: 引力モデルの超伝導基底状態の相図

斥力の場合、スピンの対称性を自発的に破る可能性を考慮した変分波動関数

$$\Psi = g^{\hat{d}} \prod_{i \in X=A \text{ or } B, \sigma} (1 - (1 - s_{X\sigma})n_{i\sigma}) |FS\rangle \quad (3)$$

を用いると B-R よりもさらにエネルギーが低くなることがわかった。ここで A と B は二つの副格子を区別する指標である。half filling ($n = 1$) では $u > 8(\sqrt{2} - 1)$ で $g - 1$ と $s_{A\sigma} - s_{B-\sigma}$ の値が有限になる。つまり相互作用を強くしていくと FL から反強磁性相 (AF) への量子相転移が起こる。このモットハバード転移では有効質量は発散せず有限に留まり、そのかわりハバードギャップが開いて絶縁体になる。Fig.1 に示したように電子密度が half filling から少しずれたときは相互作用の変化につれて、FL から AF になり再び FL に戻るリエントラント現象が見られる。また対応する物質として $R_{1-x}\text{Ca}_x\text{TiO}_{3+y/2}$ の実験結果 [2] を元にした相図を Fig.2 に掲げる。

引力の場合は、並進対称性を破る可能性を取り入れた

$$\Psi = g_A^{\hat{d}_A} g_B^{\hat{d}_B} |FS\rangle \quad (4)$$

という波動関数を用いると、一部のパラメータ領域で B-R 状態よりエネルギーが低くなる。実際には引力の場合は超伝導秩序が現れた方がエネルギーが低くなるが、高温では Fig.3 のような相図が期待できるのではないかと考えている。

さらに $|\Psi_0\rangle$ として BCS 型超伝導状態を取り

$$|\Psi\rangle = g_A^{\hat{d}_A} g_B^{\hat{d}_B} |\Phi_{\text{BCS}}(\theta_k)\rangle \quad (5)$$

のように並進対称性の破れを考えると、電荷密度波と超伝導の共存する相を表すことができる。これを超固体 (SS) と呼ぶことにする。Fig.4 に示すように、half filling 近傍で BCS 相から SS 相への量子相転移が起こる。電子密度が極端に half filling からずれると、SS への相転移はなくなるが、そこでも g は相互作用が強くなるにつれてどんどん大きくなり、BCS 型超伝導から、電荷をもった複合粒子の Bose-Einstein Condensation (BEC) による超流動相に移行していると考えられる。

ここで議論した量子相転移は、自由エネルギーを相互作用で 2 階微分した値に跳びが出るという意味で、すべて 2 次の相転移である。今回の研究では、斥力ハバードモデルにおいて、超伝導秩序の出る可能性を取り入れていないので、今後は斥力モデルでの超伝導相の可能性を探求していきたいと考えている。

References

- [1] W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Phys. Rev.* **B2**, 4302 (1970).
- [2] T. Katsufuji, Y. Taguchi, and Y. Tokura, *Phys. Rev.* **B56**, 10145 (1997).