

Quantum Phase Transition in $d = \infty$ Hubbard Model

早稲田大学 理工学部 物理学科 斎藤 慎一¹, 吉元 広行, 栗原 進
NTT 基礎研究所 鈴木 康夫

我々は、無限大次元の Hubbard 模型を Gutzwiller 波動関数に反強磁性相関を取り入れることで以下のことを示した。Brinkman-Rice 理論で記述される Fermi 液体から反強磁性体へモット転移する際、有効質量は増大するが発散しない。ハーフ・フィリングでは、ハバード・ギャップが開くことで絶縁体化する。キャリアをドーブすると反強磁性金属相が現れるが、ランダウのフェルミ液体論を反強磁性領域に拡張して解析した結果、この領域では準粒子間に引力が働く。従って、超伝導相を含む豊富な相が実現し、相互作用の大きさや粒子数を変化させることで量子相転移することが判明した。

1 反強磁性相関を取り入れた Gutzwiller 波動関数

無限大次元の Hubbard 模型は次のように定義される [1]

$$H = -\frac{t_1^*}{\sqrt{2d}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \frac{t_2^*}{\sqrt{2d}} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1)$$

ここで、パーフェクト・ネスティングをさけるため、最近接ホッピング t_1^* の他に、次近接サイトへのホッピング t_2^* [2] を導入した。無限大次元では Gutzwiller 波動関数による解析を厳密に行うことができる [1]。ところが、Gutzwiller 波動関数は強結合領域における反強磁性相関を取り入れていない。そこで、我々は、自発的にスピン空間の回転対称性と並進対称性を破る可能性を取り入れた次のような単純な波動関数を考えた、

$$|\Phi\rangle = \prod_{i\sigma} [1 - (1 - g)n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}][1 - (1 - s_{i\sigma})n_{i\sigma}] |\text{Fermi Sea}\rangle. \quad (2)$$

ここで、2重占有数を調整する変分パラメータ g に加えて1重占有数した状態の確率振幅も調整するパラメータ $s_{i\sigma}$ を導入した。

変分計算の結果、ハーフ・フィリング近傍で相互作用を増大させると、Brinkman-Rice 理論 [3] で記述される Fermi 液体から反強磁性体へモット転移することが判明した。運動量分布関数のフェルミ面での跳びから、準粒子の有効質量を見積もることができるが Brinkman-Rice 理論に反して、反強磁性転移する際、有効質量は発散しない。化学ポテンシャルの粒

¹E-mail: saito@kh.phys.waseda.ac.jp

子数依存性を調べてみると、ハーフ・フィリングではハバード・ギャップが開いているため絶縁体であることがわかる。一方、ハーフ・フィリングからずれると、反強磁性金属相が実現する。ところが、この領域では圧縮率が負になり、文字通り解釈すると相分離してしまう。そこで、ランダウのフェルミ液体論を反強磁性金属に拡張して現象論を展開してみたところ、この領域では準粒子間に引力が生じていることが判明した。従って、超伝導状態に相転移するものと考えられる。超伝導相関まで考慮すると相分離は現れない。このように、常伝導相におけるみかけの相分離が、実際には超伝導状態になることで実現しないということは、すでに P. Nozières-S. Schmitt-Rink [4] によって指摘されている。

2 相図

変分計算の結果から、図1のような相図を得た。ここで、FL, AF+SC, AFは、それぞれ、

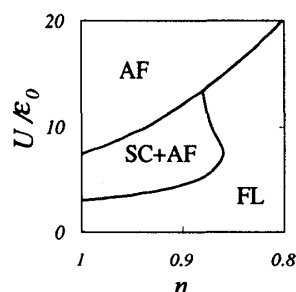


図 1: 変分波動関数から決定された無限次元 Hubbard 模型の相図。 ϵ_0 はバンド幅、パラメータは $t_2/t_1 = 1/4$ に選んだ。

フェルミ液体相、反強磁性と超伝導の共存相、長岡強磁性的な完全反強磁性相である。

謝辞

この研究は、早稲田大学特定課題研究助成費 (98A-855) によって支援されている。

参考文献

- [1] W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
- [2] E. Müller-Hartmann, Z. Phys. B **74**, 507 (1989).
- [3] W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 4302 (1970).
- [4] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985).