

§ 4. 結 論

二つの方法で調べた結果、基底状態は反強磁性である事が結論された。詳しくは文献 3 を見て下さい。

参 考 文 献

- 1) T.Ogawa, K.Kanda and T.Matsubara Prog. Theor. Phys. 53 (1975), 614
- 2) L.G.Caron and G.Kemeny Phys. Rev. B3 (1971) 3007
- 3) K.Kubo and M.Uchinami Prog. Theor. Phys. 54 (1975) 1289

電 子 相 関 と 反 強 磁 性 状 態

東教大理 打 波 衛
高 野 文 彦

§ 1. 序

電子間の相関効果を考慮するのに、Gutzwiller による変分原理に基づく方法に注目する。従来の方法では、全ての格子点が同等である場合（即ち、常磁性及び強磁性状態）しか取り扱えない。そこで格子点が同等でない場合も取り扱える様に拡張する。特に、二種類の格子点からなる反強磁性状態に注目して、電子相関の考慮が反強磁性の安定性に及ぼす効果について調べた。電子数 $\bar{n}$ （原子当りの電子数）を横軸に、intra-atomic な相互作用の強さ U を縦軸に取り、常磁性及び反強磁性状態に対する相図を描いた。

§ 2. 密度行列の決め方

次の様に定義された密度行列

$$\begin{aligned} \rho_{n,m}(h_1, \dots, h_n; p_1, \dots, p_m; f_1, \dots, f_n; q_1, \dots, q_m) \\ = \langle \Psi | c_{h_1 \uparrow}^+ \dots c_{h_n \uparrow}^+ c_{p_1 \downarrow}^+ \dots c_{p_m \downarrow}^+ c_{q_1 \downarrow}^+ \dots c_{q_l \downarrow}^+ c_{f_1 \uparrow} \dots c_{f_n \uparrow} | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

を使えば、Hubbard モデルの基底エネルギー E は

$$E = \sum_{i,j} t_{ij} \{ \rho_{1,0}(i;j) + \rho_{0,1}(i;j) \} + U \sum_i \rho_{1,1}(i;i;i;i) \quad (2)$$

と表わされる。

2つの部分格子 (A と B) からなる反強磁性状態に於ける Bloch 表示から Wannier 表示への変換は

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N_a}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{i\sigma} p_{\mathbf{k}i}^\sigma \quad (3)$$

で定義される。ここで $p_{\mathbf{k}i}^\sigma = u_{\mathbf{k}}^\sigma$ ($i \in A$ の時) or $v_{\mathbf{k}}^\sigma$ ($i \in B$ の時)。Bloch 表示で表わされた Hartree-Fock 基底状態

$$|\Psi_{\text{HF}}\rangle = \prod_{(\mathbf{k}\uparrow)} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \prod_{(\mathbf{k}\downarrow)} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (4)$$

(但し、 $(\mathbf{k}\sigma)$ はスピン σ の電子によって占有された Bloch 状態の set $(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N_\sigma})$ を示す。)

は、(3) 式を使って Wannier 表示で表わされる。その際、Gutzwiller の精神に従って 相関効果を特徴づける変分パラメーター η と η' ($0 < \eta, \eta' < 1$ で、A 一部分格子に η を、B 一部分格子に η' を対応させる) を導入する。各部分格子に於ける doubly occupied sites の数に比例して、その分極状態の確率振幅を制限する因子 $\eta^\nu, \eta'^{\nu'}$ (ν, ν' はそれぞれ A, B 部分格子に於ける doubly occupied sites の数) を含む変分波動関数 $|\Psi_G\rangle$ を考え、この変分波動関数を使って密度行列 (1) を定義する。なお密度行列で、着目している要素以外のものについては dynamical な寄与を無視し、static な configuration からの寄与のみを考慮する。この事は密度行列を以下の様な形に仮定することに対応する。

例えば、 $\rho_{n,0}$ について

$$\begin{aligned} \rho_{n,0}(h_1, \dots, h_n; f_1, \dots, f_n) \\ \approx c_n(n_1, n_1') (w_{\uparrow}(i-j) \begin{vmatrix} h_1 & \dots & h_n \\ f_1 & \dots & f_n \end{vmatrix}) \end{aligned} \quad (5)$$

の形を仮定する。ここで

$$w_{\sigma}(i-j) = \frac{2}{N_a} \sum_{(\mathbf{k}\sigma)} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} p_{\mathbf{k}i}^{\sigma} p_{\mathbf{k}j}^{\sigma} \quad (6)$$

n_1, n_1' は各々 $(h_1, \dots, h_n), (f_1, \dots, f_n)$ に含まれる A 部分格子の数である。密度行列 (1) が満足する漸化式

$$\begin{aligned} \sum_g \rho_{n+1,m}(h_1, \dots, h_n, g; p_1, \dots, p_m; f_1, \dots, f_n, g; q_1, \dots, q_m) \\ = (N_{\uparrow}-n) \rho_{n,m}(h_1, \dots, h_n; p_1, \dots, p_m; f_1, \dots, f_n; q_1, \dots, q_m) \end{aligned} \quad (7)$$

の性質を使う為に $p_{\mathbf{k}i}^{\sigma}$ の $\mathbf{k}$ 依存性を無視して p_i^{σ} とする。但し p_i^{σ} を変分パラメーターと見なしてエネルギー E を最小にする様に決める。この時、(5) 式の形の密度行列を (7) 式に代入すればその係数の満たすべき漸化式

$$c_n(n_1, n_1') = (u^{\uparrow})^2 c_{n+1}(n_1+1, n_1'+1) + (v^{\uparrow})^2 c_{n+1}(n_1, n_1') \quad (8)$$

が得られる。この漸化式を繰り返し使って、例えば、 $\rho_{n,0}(h_1, \dots, h_n; h_1, \dots, h_n)$ の係数 $c_n(n_1) (\equiv c_n(n_1, n_1))$ は

$$c_n(n_1) = (v^{\uparrow})^{2(N_{\uparrow}-n)} \left(\frac{v^{\uparrow}}{u^{\uparrow}} \right)^{2n_1 n_1' + (N_{\uparrow}-n)} \sum_{m_{\uparrow}=n_1}^{N_{\uparrow}-n} c_{N_{\uparrow}}(m_{\uparrow}) \times \left(\frac{N_{\uparrow}-n}{m_{\uparrow}-n_1} \right) \left(\frac{u^{\uparrow}}{v^{\uparrow}} \right)^{2m_{\uparrow}} \quad (9)$$

の様に与えられる。 $c_{N_{\uparrow}}(m_{\uparrow})$ は (4) 式から (5) 式の間の考察に沿って次の様に与えられる：

$$\begin{aligned} c_{N_{\uparrow}}(m_{\uparrow}) = c_0 \sum_{m_{\downarrow}} x^{\downarrow} \left[\sum_{\nu} \eta^{2\nu} \left(\frac{m_{\uparrow}}{\nu} \right) \left(\frac{\frac{N_a}{2} - m_{\uparrow}}{N_{\downarrow} - m_{\downarrow} - \nu} \right) \right] \\ \times \left[\sum_{\nu'} \eta'^{2\nu'} \left(\frac{N_{\uparrow} - m_{\uparrow}}{\nu'} \right) \left(\frac{\frac{N_a}{2} - N_{\uparrow} + m_{\uparrow}}{m_{\downarrow} - \nu'} \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

ここで $m_{\downarrow}$ は B 部分格子に属する $\downarrow$ 電子の数を示し、 $x \sim \left(\frac{v_{\downarrow}}{u_{\downarrow}} \right)^2$ は反強磁性的な

ordering に対応して導入された変分パラメーターを示す。こうして $c_n(n_1)$ は概略的に

$$c_n(n_1) = \sum_{m_\uparrow, m_\downarrow, \nu, \nu'} (\eta \text{ と } \eta' \text{ で相関効果を, } (\frac{u_\uparrow}{v_\uparrow}) \text{ と } x \text{ で反強磁性的な ordering を特徴づける変分パラメーターを含む statistical weight}) \quad (11)$$

と書ける。 $m_\uparrow, m_\downarrow, \nu, \nu'$ についての和を各々この statistical weight を最大にする様な項で置き代える操作を行う。

同様に、密度行列 ($h \rightleftharpoons f$)

$$\rho_{n,0}(h, h_1, \dots, h_{n-1} : f, h_1, \dots, h_{n-1}) \approx c_n(n_1; \alpha_h, \alpha_f) (w_\uparrow(i-j) \Big| \begin{smallmatrix} h & h_1 & \dots & h_{n-1} \\ f & h_1 & \dots & h_{n-1} \end{smallmatrix}) \quad (12)$$

の係数 $c_n(n_1; \alpha_h, \alpha_f)$ が決められる。但し $\alpha_h = A$ (if $h \in A$) or B (if $h \in B$)。また他の密度行列についても同様の操作で係数が決められる。

今や、 E (2式) を計算するのに必要な密度行列が求められ、 $\rho_0 = c_0(0) = 1$ と規格化して、

$$\rho_{1,0}(i:j) = w_\uparrow'(i-j) \sqrt{q_{\alpha_i}^\uparrow q_{\alpha_j}^\uparrow}, \quad \rho_{0,1}(i:j) = w_\downarrow'(i-j) \sqrt{q_{\alpha_i}^\downarrow q_{\alpha_j}^\downarrow} \quad (13)$$

$$\rho_{1,1}(i;i:i;i) = \frac{\nu}{(N_a/2)} \text{ (if } i \in A) \text{ or } \frac{\nu'}{(N_a/2)} \text{ (if } i \in B) \quad (14)$$

の如く得られる。ここで

$$w_\sigma'(i-j) = \frac{1}{(N_a/2)} \sum_{(\mathbf{k}\sigma)} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}$$

$$q_A^\uparrow = \frac{m_\uparrow - \nu \left[\frac{N_a}{2} - m_\uparrow + (\eta - 1)(N_\downarrow - m_\downarrow - \nu) \right]^2}{N_\uparrow \left(\frac{N_a}{2} - m_\uparrow \right) \left(\frac{N_a}{2} - m_\uparrow - N_\downarrow + m_\downarrow + \nu \right)},$$

$$q_B^\uparrow = \frac{N_\uparrow - m_\uparrow - \nu'}{N_\uparrow} \cdot \frac{\left[\frac{N_a}{2} - N_\uparrow + m_\uparrow + (\eta' - 1)(m_\downarrow - \nu') \right]^2}{\left(\frac{N_a}{2} - N_\uparrow + m_\uparrow \right) \left(\frac{N_a}{2} - N_\uparrow + m_\uparrow - m_\downarrow + \nu' \right)}$$

$$q_A^\downarrow = \frac{N_\downarrow - m_\downarrow - \nu}{N_\downarrow} \cdot \frac{\left[\frac{N_a}{2} - N_\downarrow + m_\downarrow + (\eta - 1)(m_\uparrow - \nu) \right]^2}{\left(\frac{N_a}{2} - N_\downarrow + m_\downarrow \right) \left(\frac{N_a}{2} - N_\downarrow + m_\downarrow - m_\uparrow + \nu \right)},$$

$$q_B^\downarrow = \frac{m_\downarrow - \nu}{N_\downarrow}, \quad \frac{\left[\frac{N_a}{2} - m_\downarrow + (\eta' - 1)(N_\uparrow - m_\uparrow - \nu') \right]^2}{\left(\frac{N_a}{2} - m_\downarrow \right) \left(\frac{N_a}{2} - m_\downarrow - N_\uparrow + m_\uparrow + \nu' \right)}.$$

§ 3. 反強磁性状態でのエネルギー

エネルギー E (2) 式) は (13), (14) 式を使って計算される。 $t_{ii} = 0$ (即ち, $\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} = 0$) と取り, $e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} = 1$ (if $i \in A$) or -1 (if $i \in B$) で定義された $\mathbf{Q}$ を使えば

$$E = \frac{N_\uparrow}{2} \{ (\sqrt{q_A^\uparrow} + \sqrt{q_B^\uparrow})^2 \bar{\epsilon}^\uparrow + (\sqrt{q_A^\uparrow} - \sqrt{q_B^\uparrow})^2 \bar{\epsilon}'^\uparrow \} \\ + \frac{N_\downarrow}{2} \{ (\sqrt{q_A^\downarrow} + \sqrt{q_B^\downarrow})^2 \bar{\epsilon}^\downarrow + (\sqrt{q_A^\downarrow} - \sqrt{q_B^\downarrow})^2 \bar{\epsilon}'^\downarrow \} + U(\nu + \nu') \quad (15)$$

と与えられる。但し, $\bar{\epsilon}^\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \sum_{(\mathbf{k}\sigma)} \epsilon_{\mathbf{k}}$, $\bar{\epsilon}'^\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \sum_{(\mathbf{k}\sigma)} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ 。なお, (11) 式において statistical weight を最大にする条件を課する際, 変分パラメーター ($\eta, \eta', \frac{u^\uparrow}{v^\uparrow}, x$) は ($\nu, \nu', m_\uparrow, m_\downarrow$) に関係づけられる。そこで ($\nu, \nu', m_\uparrow, m_\downarrow$) を変分パラメーターと見なし, E を最小にする様に決める。

反強磁性状態に於いて, $N_\uparrow = N_\downarrow = \frac{N}{2}$, $\eta = \eta'$, $\nu = \nu'$, $m_\uparrow = m_\downarrow = m$ が期待さ

れ, (15) 式は,

$$E = \frac{N}{2} \{ (\sqrt{q} + \sqrt{q'})^2 \bar{\epsilon} + (\sqrt{q} - \sqrt{q'})^2 \bar{\epsilon}' \} + 2U\nu$$

と表わされる。但し, $q_A^\uparrow = q_B^\downarrow \equiv q$, $q_A^\downarrow = q_B^\uparrow \equiv q'$. $\bar{\epsilon} = \frac{1}{(N/2)} \sum_{(\mathbf{k})} \epsilon_{\mathbf{k}}$,
 $\bar{\epsilon}' = \frac{1}{(N/2)} \sum_{(\mathbf{k})} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$. 更に, 次の様な量:

$$\frac{N}{N_a} \equiv \bar{n}, \quad \frac{m}{N_a} \equiv \frac{1}{4} (\bar{n} + \bar{m}), \quad \frac{2\nu}{N} \equiv \bar{\nu}$$

で書き直すと便利であり, $\bar{m}$ は sublattice magnetization を意味する。

§4. おわりに

$\bar{m}$ 及び $\bar{\nu}$ をエネルギー E を最小にする様に決めた時, $\bar{m} \approx 0$ の解の存在は反強磁性状態が安定に存在することを意味する。 $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$ の関係が満たされる様なバンド構造について, 常磁性・反強磁性に対する相図が図-1. に与えられる。但し, $U_0 = -8\bar{\epsilon}$ とした。 $\bar{n} = 1$ が half-filled band を示す。 $\frac{U}{U_0} = 1$ が Brinkman と Rice が予想した常磁性状態での金属-絶縁体転移に対応する。

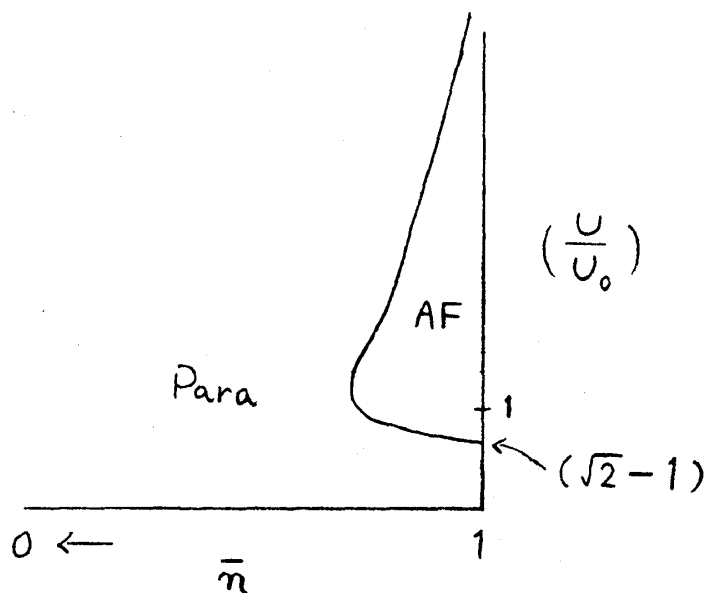


図 - 1

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²⁾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、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ヶ毎に site 表示の波動関数を g 倍 ($0 < g < 1$ の定数) する演算子 $G(g)$ を定義して $|\Psi\rangle = G(g)|\Phi\rangle / \sqrt{\langle\Phi|G^2(g)|\Phi\rangle}$ 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 $\langle\Phi| \prod_{i \in N} c_i^\dagger c_i \prod_{j \notin N} c_j c_j^\dagger |\Phi\rangle$ 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 $L \times L$ 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 Gutz-