

ハバードモデルにおける 局在スピンの温度変化と相転移

名大工 酒 向 正 彦
志 水 正 男

電子が半分詰った軌道縮退の無いハバードバンドの有限温度における電子構造と磁気的性質を、汎関数積分法¹⁾によって調べた。まず分配関数を次のように求めた。ハバードハミルトニアン²⁾の格子点 i における二体相互作用の部分について、

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2, \quad (1)$$

の変形を行う。そして右辺第2項について Stratonovich-Hubbard変換を用い分配関数を用い分配関数を書き表わす。その際ハミルトニアン内各項の非可換性に対して Feynman time-ordering trick を用いる。すると分配関数は、電子間相互作用が各格子点に磁気ポテンシャル $\sqrt{2\pi U} \xi_i(\tau)$ を持つ一体問題の形で書き表わされる。ここで U は原子内クーロン相互作用の大きさを表わす。 τ は random magnetic field ξ_i が時間依存性を持つことを表わす。しかしこの時間依存性を無視する static 近似を行う。以上の手順により分配関数は次のようになる。

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N d(\sqrt{\beta} \xi_i) \exp[-\beta F(\xi_1, \dots, \xi_N)], \quad (2)$$

ここで β は温度 $k_B T$ の逆数、 N は全格子点の数である。そして free energy functional $F(\xi_1, \dots, \xi_N)$ は random magnetic field の作用している結晶中を走るスピン関数 $G_{ii}^\sigma(E; \xi_1, \dots, \xi_N)$ を用いて次のように書き表わされる。

$$F(\xi_1, \dots, \xi_N) = \pi \sum_{i=1}^N \xi_i^2 - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE \ln \{ 1 + \exp [\beta (\zeta - \frac{U}{2} - E)] \} \\ \times [(-1/\pi) \sum_{i\sigma} \mathcal{J}_m G_{ii}^\sigma(E; \xi_1, \dots, \xi_N)], \quad (3)$$

ここで ζ はケミカルポテンシャルを表わす。この $G_{ii}^\sigma(E; \delta_1, \dots, \xi_N)$ をコヒーレントポテンシャル $\Sigma^\sigma(E)$ 中を走る一電子のグリーン関数 $g_{ij}^\sigma(E)$ と散乱の t -matrix $t_i^\sigma(E; \xi_i)$ によって次のように展開する。

$$\begin{aligned} G_{ii}^\sigma(E; \xi_1, \dots, \xi_N) &= g_{ii}^\sigma(E) + \sum_j g_{ij}^\sigma(E) t_j^\sigma(E; \xi_j) g_{ji}^\sigma(E) \\ &+ \sum_{j \neq n} g_{ij}^\sigma(E) t_j^\sigma(E; \xi_j) g_{jn}^\sigma(E) t_n^\sigma(E; \xi_n) g_{ni}^\sigma(E) + \dots, \end{aligned} \quad (4)$$

そして $\Sigma^\sigma(E)$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^N d(\sqrt{\beta} \xi_j) G_{ii}^\sigma(E; \xi_1, \dots, \xi_N) P(\xi_1, \dots, \xi_N) = g_{ii}^\sigma(E), \quad (5)$$

より決められる。ここで random magnetic field の分布関数 $P(\xi_1, \dots, \xi_N)$ は前出の $F(\xi_1, \dots, \xi_N)$ によって次のように与えられる。

$$P(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{\exp[-\beta F(\xi_1, \dots, \xi_N)]}{\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N d(\sqrt{\beta} \xi_i) \exp[-\beta F(\xi_1, \dots, \xi_N)]} \quad (6)$$

(3) から (6) までの連立式を具体的に解くことは N の値が大きい場合不可能である。ここで (4) 式において右辺第 3 項以上を無視する近似を行う。atomic limit の場合は近似とはならない。そして analytic に解ける。この近似を行うと異った格子点上の磁気モーメント間の相互作用が考慮されないので、long-range order は出現せず、常磁性状態に取り扱いが限られる。 $\Sigma^\sigma(E) \equiv \Sigma(E)$ そして $g_{ij}^\sigma(E) \equiv g_{ij}(E)$ とする。

$$\left. \begin{aligned} P(\xi_1, \dots, \xi_N) &= \prod_{i=1}^N P(\xi_i), \\ F(\xi_1, \dots, \xi_N) &= \sum_{i=1}^N F(\xi_i), \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

となって、ここで、

$$P(\xi_i) = \exp[-\beta F(\xi_i)] \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d(\sqrt{\beta} \xi_i) \exp[-\beta F(\xi_i)] \right\}^{-1} \quad (8)$$

$$F(\xi_i) = F^{(1)} + F^{(2)}(\xi_i), \quad (9)$$

$$F^{(1)} = -\frac{2}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE \ln \left\{ 1 + \exp \left[\beta \left(\zeta - \frac{U}{2} - E \right) \right] \right\} \left[(-1/\pi) \mathcal{J}_m g_{ii}(E) \right], \quad (10)$$

$$F^{(2)} = \pi \xi_i^2 - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE \ln \left\{ 1 + \exp \left[\beta \left(\zeta - \frac{U}{2} - E \right) \right] \right\} \\ \times \left\{ (-1/\pi) \sum_{j\sigma} \mathcal{J}_m \left[t_i^\sigma(E; \xi_i) g_{ij}(E) g_{ji}(E) \right] \right\}, \quad (11)$$

となり、 $\Sigma(E)$ を決める条件式は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} d(\sqrt{\beta} \xi_i) t_i^\sigma(E; \xi_i) P(\xi_i) \equiv \langle t_i^\sigma(E; \xi_i) \rangle_\xi = 0, \quad (12)$$

と表わされ、帯磁率は次の式で与えられる。

$$\chi(T) = (\mu_B^2 N/U) [2\pi\beta \langle \xi_i^2 \rangle_\xi - 1] \quad (13)$$

数値計算は簡単のため、相互作用していない系のエネルギーバンド幅 W の半円型を仮定した。計算結果は次のようである。まず $T=0K$ においては、 $U/W < 0.29$ では磁気モーメントの大きさが零で、 U/W の値に依存しない。これは static 近似がまったく不適当なためである。 $U/W > 0.35$ でエネルギーバンドはギャップを持つ。

$U/W = 0.5$ について $P(\xi_i)$ 、状態密度、自由エネルギー、帯磁率、比熱の温度変化を求めた。 $T=0K$ では状態密度にギャップがあり絶縁状態である。そして $P(\xi_i)$ は $\pm$ スピンの局在モーメントに対応した ξ_i の値で 2 個の δ 関数型の分布を示す。温度が少し上昇すると有限の分布の幅を持ち、状態密度のギャップは滑らかに消えてゆく。したがって明確な金属絶縁体転移は無い。さらに温度が上昇すると、 $P(\xi_i)$ の 2 個のピークは $k_B T/W = 0.21$ で $\xi_i = 0$ における 1 個のピークになってしまう。局在モーメントはこの温度で消失すると考える。この $P(\xi_i)$ の温度変化の様子は相転移の無い atomic limit の場合と大体同じであるが、次の点で異なる。 $\langle \xi_i^2 \rangle_\xi$ の温度変化

を計算するとこの局在モーメント消失温度近傍では, random magnetic field の熱ゆらぎの増加がある。これが帯磁率の温度変化に小さな異常 ($\chi(T)^{-1}$ の曲線が軽く折れ曲る) を与えている。自由エネルギーの温度変化は atomic limit の場合と大体似ている。 $k_B T/W \lesssim 0.21$ では温度変化が $F^{(2)}(\xi_i)$ からの寄与(局在的)に特長づけられ $k_B T/W \gtrsim 0.21$ では $F^{(1)}$ からの寄与(バンド的)に特長づけられている。比熱の温度変化については, $k_B T/W \simeq 0.2$ に1個のピークを持つ。

(尚, この話の詳しい内容は J. Phys. Soc. Japan 40 (1976) Apr. に掲載される予定です。)

参 考 文 献

- 1) W. E. Evenson, J. R. Schrieffer and S. Q. Wang: J. Appl. Phys. 41 (1970) 1199

電子相関による金属非金属転移

川 畑 有 郷

金属非金属転移は色々な物質に見られ,¹⁾ その様子は物質により色々である。そのメカニズムも物質により異なると思われるが, ここでは $V_2 O_3$ について考える。問題にするのは, paramagnetic な金属相と絶縁体相の boundary である。この phase boundary は critical point をもつので²⁾ gas-liquid transition と同様に, 金属と絶縁体の間には本質的な差はないと考えられる。モデルとしては, Hubbard モデルをとり,

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + I \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

transfer energy t_{ij} が系の体積によるとする。実験的には, 転移は圧力によって起こっており, 転移に際して体積変化が見られるのでこのようなモデルを取った。系の自由エネルギー $F(V)$ (V は系の体積) は

$$\frac{\partial F}{\partial V} = \sum_{ij,\sigma} (\partial t_{ij} / \partial V) \langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle$$

で与えられる。 t_{ij} を nearest neighbour のみにとり, 相互作用のない時のバンド巾 Δ が t_{ij} に比例することに注意すると,