

ハバード模型の反強磁性基底状態

久 保 健

§ 1. 問 題

我々は以下の条件の時ハバード模型が反強磁性基底状態を持つかどうか調べた。

- 1) 電子数 = 格子数 (half-filled)
- 2) 相互作用がない時の staggered 帯磁率 $\chi_0(Q)$ が発散。(例：一次元, 最近接間相互作用のみを持つ正方格子, s.c. 及び b.c.c. 格子)
- 3) 相互作用 I が弱い極限

ハートリーフォック (H. F.) 近似では上述の場合無限小の I で反強磁性となる事が知られているが, 相互作用の効果はフェルミ面近傍で特異的であり, 電子相関が重要である。電子相関を取り入れた議論としては Gutzwiller の方法による小川等の議論¹⁾と摂動論による Caron 等の議論²⁾がある。彼らの結論によると有限な I_c があって, $I_c > I$ の場合は常磁性基底状態を持つとしている。双方の議論ともその近似に不明な点があり充分説得的とは言えないと思う。そこで我々は Gutzwiller 変分法及び摂動論の二通りの方法でもう少し注意深く上の問題を検討しなおしてみた。

§ 2. Gutzwiller 変分法

基底状態の変分波動関数として $|\Psi\rangle = \prod_i (1 - \delta P_i) |\Psi_0\rangle$ をとる。ここで, $P_i = n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, δ は二電子によって占められた格子点の減少を表す変分パラメータ。 $|\Psi_0\rangle$ は H. F. 近似での反強磁性状態に選ぶ。但しギャップ Γ は変分パラメータとして残しておく。エネルギー期待値は,

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

ここで $\mathcal{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + I \sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ 。 I が小さい時 δ も小さいと予想されるから $\langle E \rangle$ を δ で展開して,

$$\langle E \rangle = E_0 - \delta E_1 + \delta^2 E_2 + \dots$$

E_1 及び E_2 は $\mathcal{H}$ 及び p_i の積の $|\Psi_0\rangle$ での期待値で表わされ正確に求められる。フェルミ面近傍での波数積分が対数発散を与えるので注意深く計算すると Γ の小さい時、次の様になる。

$$E_1 \simeq N \left[\epsilon_1 I - \frac{1}{2} \rho_0 \Gamma^2 \log \frac{D}{\Gamma} + \frac{1}{4} \rho_0^2 I \Gamma^2 \left(\log \frac{D}{\Gamma} \right)^2 \right]$$

$$E_2 \simeq N \left[\epsilon_2 + \epsilon_3 I + \epsilon_4 \rho_0^2 \Gamma^2 \left(\log \frac{D}{\Gamma} \right)^2 \right]$$

ここで ϵ_i は定数 ($\epsilon_1 > 0, \epsilon_2 > 0$)。 ρ_0 はフェルミ面での状態密度、 D はバンド巾である。エネルギーを最小にする δ は $\delta = E_1 / 2 E_2$ 。 $I \rightarrow 0, \Gamma \rightarrow 0$ で $E_1 \rightarrow 0, E_2 \rightarrow \text{finite}$ だから $\delta \rightarrow 0$ となり、最初の仮定が正しい事が判る。この時エネルギーに対する補正は

$$\Delta E \simeq -\frac{N}{4} \frac{\epsilon_1^2}{\epsilon_2} I^2 + O(I^3, I^2 \Gamma^2 \left(\log \frac{D}{\Gamma} \right)^2, I \Gamma^2 \log \frac{D}{\Gamma})$$

$$E_0 \simeq 2 \sum_k \epsilon_k + \frac{1}{4} I N + \frac{1}{4} N \rho_0^2 \Gamma^0 \left[\log \frac{D}{\Gamma} - \rho_0 I \left(\log \frac{D}{\Gamma} \right)^2 \right]$$

であるから、 I が小さい時 E を最小にする Γ は $\Gamma \sim D \exp \left[-\frac{1}{\rho_0 I} \right]$ となり ΔE からの補正は最低次では効かない事が判る。

§3. 摂動法

無摂動系として運動エネルギーと反強磁性の平均場をとりこんだ一体ハミルトニアンをとる。

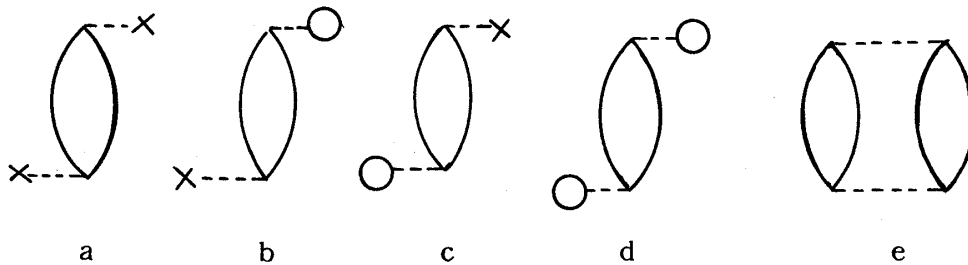
$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \mathcal{H}_1$$

$$\mathcal{H}_1 = I \sum_{i \in A, \sigma} M_{-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + I \sum_{i \in B, \sigma} M_{\sigma} b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma}$$

A, B はそれぞれ二つの部分格子を表わす。ここで $M_{\sigma} = \frac{1}{2} (1 + \sigma \Gamma / I)$ 。摂動ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}' = I \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mathcal{H}_1$$

$\mathcal{H}_0$ の基底状態はギャップ Γ をへだてた二つのサブバンドの内下のバンドがつまった状態である。一次の摂動を加えると H. F. 近似のエネルギーを与える。二次の項は五個のダイアグラムで表わされる。



a ~ d のダイアグラムは常磁性では現われない。e の寄与は次の様になる。

$$\Delta E_e \cong \Delta E_e(\Gamma=0) + N C \rho_0^3 I^2 \Gamma^2 \left(\log \frac{D}{\Gamma} \right)^3$$

ここで $C = \frac{1}{24}$ 1次元の場合

$< \frac{1}{48}$ 2, 3次元の場合

全エネルギーは Γ の小さい時

$$E \cong E(\Gamma=0) + N \left[\frac{1}{4} \rho_0^2 I \Gamma^2 \left(\log \frac{D}{\Gamma} \right)^2 + \left(C - \frac{1}{4} \right) \rho_0^3 I^3 \left(\log \frac{D}{\Gamma} \right)^3 \right]$$

となる。エネルギー最小から Γ を求めると $\Gamma \sim D \exp \left[- \frac{C'}{I \rho_0} \right]$ となり,

$$C' = \frac{6}{5} \quad 1 \text{次元}$$

$$< \frac{12}{11} \quad 2, 3 \text{次元}$$

となる。

§ 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

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