

| | |
|--------------|---|
| Title | Many Body Effects in Low-Dimensional Hubbard Model |
| Author(s) | 大塚, 博巳 |
| Citation | 大阪大学, 1992, 博士論文 |
| Version Type | |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/38015 |
| rights | |
| Note | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。 |

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

【3】

| | |
|---------------|---|
| 氏名 | おお つか ひろ み |
| 博士の専攻分野の学位記番号 | 大塚博巳 博士 (理学) 第 10109 号 |
| 学位授与年月日 | 平成 4 年 3 月 25 日 |
| 学位授与の要件 | 学位規則第 4 条第 1 項該当 理学研究科 物理学専攻 |
| 学位論文名 | Many Body Effects in Low-Dimensional Hubbard Model (低次元ハバード模型に於ける多体効果) |
| 論文審査委員 | (主査) 教授 吉川 圭二 (副査) 教授 興地 斐男 教授 大坪 久夫 教授 斎藤 基彦 助教授 城 健男 助教授 阿久津泰弘 |

論文内容の要旨

電子間相互作用の持つ効果を理論的に解明することを目的として導入された格子フェルミオン模型のうちで、最も基本的なハバード模型の性質を量子モンテカルロ法 (QMC) を用いて研究し、その温度依存性、励起スペクトル、基底状態の様子を数値的に明らかにした。本研究は、“1986年に Bednorz と Mueller によって La-Ba-Cu-O 系において発見された高温超伝導のメカニズムを明らかにする鍵が低次元ハバード模型の中にある” との考えがその動機となっている。

Kawakami, Okiji 達は 1989 年に Bethe 仮説を用いて一次元系の電荷感受率 (χ_c) の温度依存性を調べ、ハーフ・フィールド近傍においてエンハンスメントがあり、基底状態では電荷の揺らぎが発散していることを明らかにした。それに対して QMC シミュレーションを行うことにより、バンド構造が異なる二次元系でも定性的に同じ振舞が存在することが確認できた。即ち、ハーフ・フィリング ($\rho = 1$) の場合 χ_c は低温に行くにしたがって単調に減少し、基底状態は電荷の励起に関してギャップを持った絶縁体になっていると考えることが出来るのに対して、 $\rho = 1$ の近傍では χ_c は温度の減少と共に急速に増加し、基底状態において電荷の揺らぎが大きくなり得る様子を示している。

次に QMC によって提供された虚軸上の相関関数のデータを実軸上に数値的に解析接続を行なうことにより一次元系の動的な性質 (スピン、電荷励起などに関するスペクトル関数) を調べた。スピン励起のスペクトルはフィリング、相互作用定数 (U) に依らずギャップレスであり $\rho = 1$ の場合、厳密解より得られるスピン波の分散関係と、スペクトルのピーク位置の波数依存性とが良い一致を示す。それに対して $\rho = 1$ の場合の電荷励起は U の増加と共にそのピーク位置を高エネルギー側にシフトさせ、U のオーダーのギャップを持つ。このギャップは hole を僅かにドーピングすることにより完全に消失する。同

様の手法を用い、光吸収スペクトルの振舞が電荷励起と類似した特徴を持つことを明らかにした。

最後に新しい変分モンテカルロ法 (VMC) として補助場を導入した方法を提案した。それにより今までの電子の配置空間における MC 法では取扱う事の出来なかった非対角型の相関を持つ変分関数を数値的に扱うことが可能になった。Gutzwiller の変分関数を拡張しトランスファー項をサイト間相関として含む試行関数を取扱うことにより $\rho = 1$ の場合に重要な効果である二重占有のサイト (d) と空のサイト (e) 間の引力的な相関を取込むことに成功した。それにより強相関領域に於ける運動量分布の振舞が大幅に改善され、絶縁相からの摂動計算の結果と大変良い一致を得ることが出来た。それと共に、スピン構造因子では反強磁性の構造が強くエンハンスされ、電荷の構造因子では e-d サイト同士のペアリングの形成を反映して長波長領域で強く抑えられる振舞を得た。また変分エネルギーについても一次元系の場合は Bethe 仮説の値と極めて近く、二次元系では反磁性 Hartree-Fock の値よりも低いエネルギーを実現している。

論文審査の結果の要旨

ハバード模型は、固体中の電子系について、原子間移動と電子間相互作用を取り入れた最も簡単な模型であって、しかも絶縁体相、金属相、各種磁性相等のパラエティに富む電子状態の可能性を秘めている。大塚君の研究は、2次元ハバード模型について、量子モンテカルロ法に基づいて静的電荷感受率、各種動的感受率の信頼できる計算を与えることに成功し、幾つかの新しい事実を発見した。さらに将来有望な変分計算法も創案している。その内容は、博士 (理学) の学位論文として十分なものであると認める。