

氏名(本籍)	さか もと はる み 坂本晴美(茨城県)
学位の種類	博士(理学)
学位記番号	博乙第1560号
学位授与年月日	平成11年10月31日
学位授与の要件	学位規則第4条第2項該当
審査研究科	物理学研究科
学位論文題目	Ferromagnetism in the Two-Band Hubbard Model (2バンド・ハバード模型における強磁性)
主査	筑波大学教授 理学博士 高田 慧
副査	筑波大学教授 理学博士 押山 淳
副査	筑波大学助教授 理学博士 平島 大
副査	青山学院大学教授 理学博士 久保 健

論文の内容の要旨

金属強磁性の理論的研究は既に50年以上に歴史をもつが、未だに十分な理解が得られていない難問である。金属強磁性を考察する際の個体内電子の模型としてHubbard模型がある。単軌道Hubbard模型では電子は格子点に仮定された単一の軌道間を跳び移り、2個の電子は同一格子点に居る時のみ相互作用エネルギー U を持つ。分子場理論によれば、 U が十分大きければ単純なバンド構造でも強磁性基底状態が実現するが、分子場理論には相関効果が考慮されていない為不正確であり、この模型が実際に強磁性になる為にはさらに特別な条件が必要である事が近年明かになって来た。その内の一つの条件は特殊なバンド構造の存在である。Lieb, 田崎らは平坦或はほぼ平坦なバンドに電子が半分つまっている場合に、強磁性基底状態が実現し得る事を証明した。しかし彼らの証明は絶縁体状態の場合に限られており、金属強磁性状態の安定性は、強相関の極限における摂動論以外には十分調べられていなかった。別の強磁性安定化の道筋は軌道縮退の存在である。現実の強磁性金属の多くでは3d軌道の縮退が重要であるとの指摘が1930年代からされて来たが、縮退を考慮した信頼できる理論的計算は従来ほとんど存在しなかった。

本論文は、上記の問題を一次元系を用いて主に数値的な方法を用いて研究したものである。用いられた主要な方法は密度行列繰り込み群(DMRG)の方法であり、第2章はその解説に当てられている。

第3章において著者は2バンド構造を持つ単軌道Hubbard模型をとりあげ、その系の基底状態を調べている。この模型はパラメタを変化させることにより平坦バンド模型から有限バンド幅を持つ系へ連続的に変化する。バンド幅と電子数密度 $n = (\text{電子数}/\text{格子数})$ を変化させつつ格子数32までの有限系の基底状態を調べ、次の結果を得た。

- (1) バンド幅が有限であっても一般の $n < 1$ に対し相互作用が十分強い時は強磁性基底状態が安定である。
- (2) 強磁性基底状態が安定化する相互作用の臨界値は低密度ほど小さくなる。

サイズ依存性は収束の傾向を示し、上の結果は無限系でも正しいと考えられる。(1)は相互作用が有限な範囲で金属強磁性の安定性を数値的に確かめた最初の信頼できる結果である。

第4章では2重縮退した軌道を持つ1次元ハバード模型の基底状態が研究された。この模型には同一格子点上の相互作用パラメタとして、異なる軌道間のクーロンエネルギー U' とフント結合 J が含まれる。最近接格子点間に

のみ電子の跳び移り積分 t がある格子数 16 までの系の基底状態相図を DMRG 法によって求め、次の結果を得た。

- (1) 密度 $0 < n < 2$ の領域で $J < U'$ かつ $U' - J > 5 |t|$ ならば強磁性状態が安定である。
- (2) $n < 1$ の場合と $n = 1$ の場合を比較すると、前者の方が弱相関領域では強磁性の安定領域が広いが、 $U' - J \gg t$ の領域では両者の相境界は一致する。
- (3) $n > 1$ の場合 $J < U'$ の非常に広い範囲で強磁性基底状態が安定である。

結果のサイズ依存性はほとんど無く、無限系でも上記の結果が成り立つと考えられる。

さらに著者は次近接より遠方への跳び移りの効果を調べ、 $n < 1$ の場合は遠方への跳び移りにより強磁性状態が不安定化されるが、 $n > 1$ の場合は不安定化されないとの結果を得た。そして、 $n = 1$ 及び $n < 1$ の結果が強相関極限から得られる摂動論的有効ハミルトニアンによって理解できる事、特に $n < 1$ では 1 次元特有の電荷とスピン軌道自由度の分離が強磁性を安定化している事が示された。また $n > 1$ の結果は無限大次元の結果と一致しており、この場合はいわゆる二重交換相互作用が次元によらず強磁性を実現する有力なメカニズムである事が示された。これに対し $n < 1$ の場合は、本研究の結果と既に知られている無限大次元の結果が相反する傾向を示した。 $n < 1$ はニッケルの電子状態に対応しており、2 次元、3 次元系での研究は重要な研究課題として残されている。

さらに電荷密度波長距離秩序の存在、強磁性相と反強磁性相の 2 相分離、不完全強磁性の可能性等の興味深い結果が得られている。

審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文では 1 次元における 2 バンド構造を持つ単軌道ハバード模型及び 2 重縮退ハバード模型の基底状態が密度行列繰り込み群の方法を用いて研究された。その結果、両方の模型で相互作用が十分大きければ金属強磁性状態が実現する事が明かになった。これは、1 次元における金属強磁性状態の安定性を信頼できる方法により確立した最初の結果であり、磁性理論の発展に対する重要な寄与である。 $n > 1$ の場合は、この結果と既に知られていた無限大次元の結果により、フント結合が次元によらず強磁性実現に重要である事が確立された。一方 $n < 1$ の結果は、強磁性の安定性がこの場合次元性に強く依存する事を示唆している。以上の結果は今後の強磁性研究に大きな影響を与えるものである。

よって、著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。