

Generalized Hartree-Fock法および Hartree-Fock-Bogoliubov法による三角格子系の計算

(名大院情・金沢大理・阪大院理) ○山木大輔、安田耕二、長尾秀実、山口兆

【序】 三角格子スピン系のようなスピントラクション系に対して、Generalized Hartree-Fock(GHF)法を適用すると図 1 (A)のような傾いたスピン密度を与え、妥当な描像を与える[1]。一方、Unrestricted Hartree-Fock(UHF)法では3個の結合を等価に扱うことができない(図 1 (B))。また、超伝導系に対しては、超伝導において重要である対相関を考慮する、Generalized Hartree-Fock-Bogoliubov (GHFB)法が妥当な描像を与えられている[2]。

最近、コバルト酸化物に超伝導が見いだされた[3]。この系では2次元三角格子が超伝導発現に重要であると考えられている。そのため、GHF法・GHFB法が、三角格子系に対して、どのような解をあたえるのかは興味深い。

本研究では三角格子系の基本構造である三角形モデルに注目する。このモデルに対しUHF・GHF・GHFB法を適用し、解の比較をおこなう。

【モデル・計算】 図 2 に示すような、3サイト3電子ハバードモデルを計算に用いた。超伝導で重要な電子間有効引力相互作用を考慮するため、正負の両方のUの値を扱った。軌道は実数であることを仮定し、一電子積分 t は1に固定した。与えられたUにたいして、UHF法、GHF法、GHFB法により、エネルギーを計算した。UHF法とGHF法では、それぞれのエネルギーの表式内のMO係数を直接最適化し、エネルギーを計算した。GHFB法では通常のSCF計算を行い、さらに粒子数の調整のために化学ポテンシャルも最適化した。

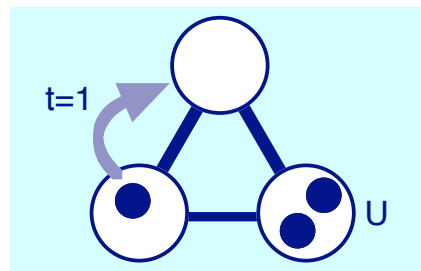
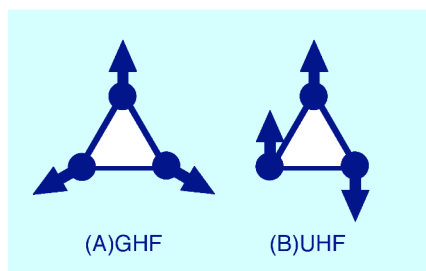


図 1 GHF・UHF法によるスピン密度 図 2 3電子3サイトハバードモデル

【結果】 図3は、各手法によるエネルギーのU依存性を示す。 細い実線はUHF法、破線はGHF法・太い実線はGHFB法によるエネルギーを示す。 正のUの領域のGHFB法によるエネルギーは、収束解が得られなかった、または、対相関の効果の無い、GHF・UHFの解と同一の解を与えたため、表示していない。 負のUの領域、すなわち、2電子間の相互作用が引力的であるとき、GHFBの解が安定となった。 正のUの領域、すなわち、2電子間の相互作用が斥力的であるとき、UHFとGHF法によるエネルギーが比較的近い値を示した。 図4は、UHFとGHF法のエネルギー差を表示したものである。 結局、正のUの領域ではGHF法のエネルギーが安定であることがわかった。

【まとめ】 この3サイト3電子ハバードモデルでは、負のUの時はGHF・正のUの時はGHF解が安定となった。 有限クラスターモデルにもかかわらず、このモデルでは、わずかな負のUで対相関の寄与がある解があらわれた。 これは、高い対称性（正三角形）による縮重が原因と考えられる。 今回は、多重バンド効果による反発力起源の超伝導に対応する状態は得られなかった。 その考慮のためには周期境界条件と副格子の導入が必要であろう。

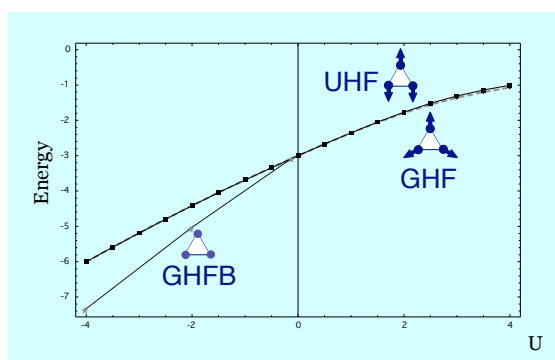


図3 エネルギーのU依存性

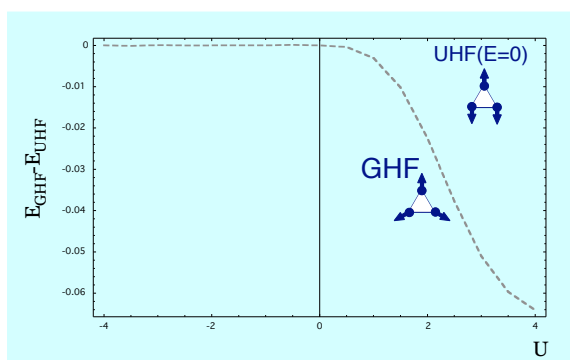


図4 UHFとGHF法のエネルギー差

参考文献

- [1] D. Yamaki et al. Int. J. Quant. Chem. **84**, 546 (2001).
- [2] D. Yamaki et al. Int. J. Quant. Chem. submitted.
- [3] K. Takada et al., Nature **422**, 53 (2003).