

Gutzwiller型変分波動関数に基づく電子相関の研究

発表者 島袋貴文

指導教官 梯 祥郎

固体の性質は電子の量子力学的運動によって決まる。Li, Na, Ca, Mgなどの単純金属においては自由電子モデルとパウリの原理によって良く説明できることが知られている。ところが、現実には電子間にはCoulomb相互作用が働いており、特に鉄族金属や希土類金属の不完全殻を形成する3d軌道、4f軌道上の電子は局在軌道上を運動しているので、それらの性質を記述するには電子相関を取り入れることが重要になってくる。アヴォガドロ数個の電子の間の相互作用を取り入れた電子系の取り扱いには一般には難しい。相互作用する多電子系を有効的な1電子問題に還元した近似がHartree-Fock近似である。しかしこの近似ではエネルギーが過大評価されてしまう。それは電子同士が避けあう多体効果が無視した近似であることに起因している。そこで本研究では、固体内電子を記述する最も簡単なハバードモデルを考え、Hartree-Fock近似で無視された多体効果を取り入れるために、変分法の立場からGutzwiller型変分波動関数を導入し、固体内での電子相関についての理論とその役割を紹介する。図は、ガウス型状態密度を用いた場合の相関エネルギー E_c と二重占有状態 $\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$ が原子内Coulomb相互作用 U と共にどのように変化するかを計算したものである。

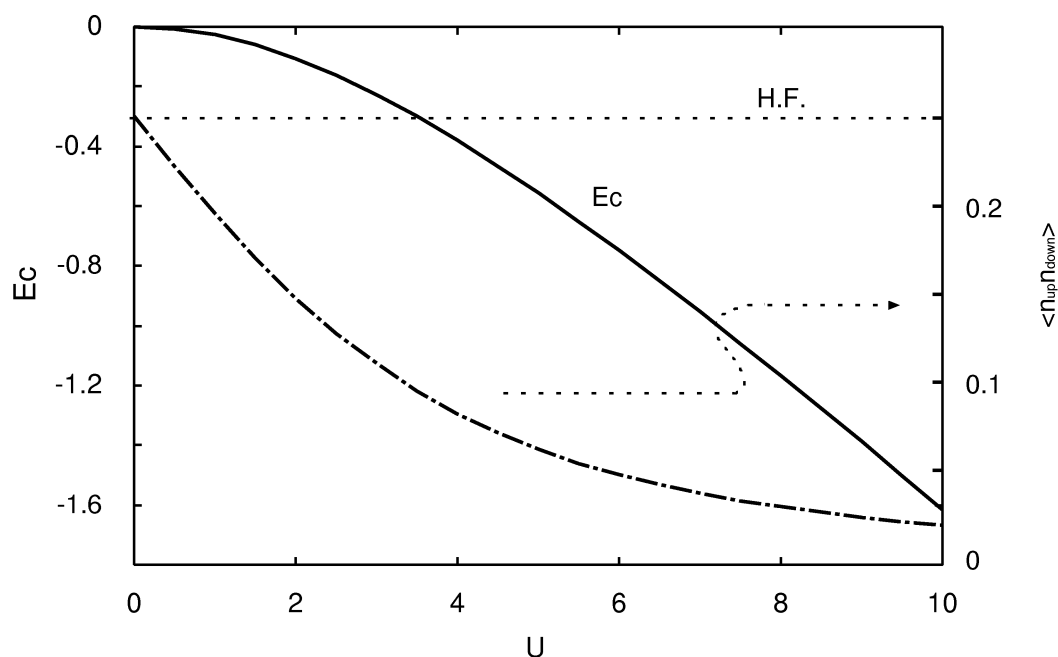


図 1: The ground-state correlation energy vs. Coulomb interaction curves.