

# チェッカーボード格子ハバードモデルにおけるフラストレーション効果の数値的研究

物質系専攻 47-096018 河室 佑貴

指導教員:上田 和夫(教授)

キーワード:幾何学的フラストレーション、チェッカーボード格子、ハバードモデル、Mielke の定理、フラットバンド強磁性

## 1 序論

金属強磁性の問題は、これまで長い間盛んに研究されてきているが、理論的な研究に関しては未だ理解が十分でない部分が多いというのが現状である。その理由としては、金属強磁性を理解するための理論的なモデルが少ないということがある。金属強磁性を記述するために有効なモデルの一つに、ハバードモデルがあり、このモデルで金属強磁性を説明する近似理論として、ハートリー・フォック近似を用いる Stoner 理論 [1] がある。しかし、強磁性の問題は多電子問題であり、ハートリー・フォック近似を越えて電子相関を考慮しても強磁性が安定に存在するかという問題は重要である。ハバードモデルにおいて、強磁性基底状態が存在することが厳密に証明されているモデルは2つある。1つめは、クーロン相互作用が無窮大で、電子が half-filling から1つ少なくなった時に強磁性が出現する長岡の強磁性 [2, 3]、そして2つめは、フラットバンドを起源とする強磁性基底状態が生じるとする Mielke、Tasaki のフラットバンド強磁性である [4]。フラットバンド強磁性については、幾何学的フラストレーションが強磁性に対して重要な役割を担っており、quarter-filling においてフラストレーションの強さと強磁性の安定性に関する研究が Kusakabe, Aoki によってなされている [5]。本研究では、フラストレーションのあるモデルの全体像を理解するために、チェッカーボード格子上のハバードモデルについて、フラストレーションの強さとクーロン相互作用に対する系の基底状態の性質を、数値対角化の方法を用いて議論する。

## 2 ハミルトニアンと手法

格子定数  $a$  (以降は  $a = 1$  とする) の  $N$  個の格子点からなる周期的境界条件でのチェッカーボード格子 (図 1) におけるハバードモデルを考える。そのハミルトニアンは、

$$H = \sum_{(im, jm'), \sigma} t_{imjm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{jm'\sigma} + U \sum_{im} n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} \quad (1)$$

である。ここで、 $c_{im\sigma}^\dagger$  ( $c_{im\sigma}$ ) は生成 (消滅) 演算子であり、 $i$  番目の格子で、スピン  $\sigma$  で副格子  $m (= A, B)$  の電子に対してのものである。また、 $n_{im\sigma} = c_{im\sigma}^\dagger c_{im\sigma}$ 、 $U$  はクーロン相互作用である。今回は、half-filling 以下で強磁性を議論するため、electron-hole transformation を行ってい

る。そして  $t_{imjm'}$  は

$$t_{imjm'} = \begin{cases} t & \text{if } m \neq m' \\ t' & \text{if } m = m' \end{cases} \quad (2)$$

であり、 $i, j$  の和は、格子上で線が引かれている部分についてとる。1 電子の分散関係は、

$$\epsilon_\alpha(\mathbf{k}) = \begin{cases} \epsilon_1(\mathbf{k}) \\ \epsilon_2(\mathbf{k}) \end{cases} = \begin{cases} 2t' \cos k_x \cos k_y - 2\sqrt{t'^2(\sin k_x \sin k_y)^2 + t^2(\cos k_x + \cos k_y)^2} \\ 2t' \cos k_x \cos k_y + 2\sqrt{t'^2(\sin k_x \sin k_y)^2 + t^2(\cos k_x + \cos k_y)^2} \end{cases} \quad (3)$$

となる。この分散関係を  $t'$  毎に表すと図 2 のようになる。特に  $t' = t$  の時は、フラットバンドが現れることが分かる。このハミルトニアンについて、 $N = 8, 16$  の系に対して数値対角化によって基底状態を求め、以下のスピン相関関数を計算する。

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (4)$$

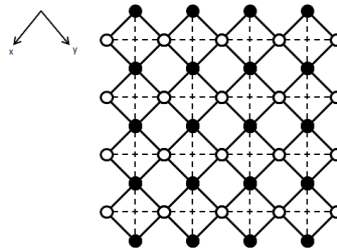


図 1 チェッカーボード格子。実線のホッピングは  $t$ 、点線のホッピングは  $t'$  である。  $\blacksquare$  は副格子  $A$ 、  $\circ$  は副格子  $B$  を表す。

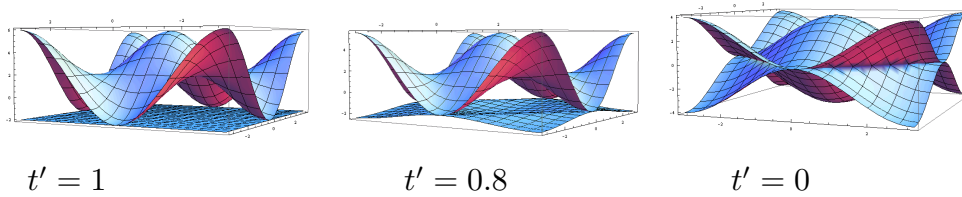


図 2  $t'$  毎の 1 電子のエネルギー分散関係 ( $t = 1$  とする)

### 3 結果

$N = 16$  の系について電子数  $N_e = 8, 16$  に対しての数値対角化の結果を図 3 に示す。 $N_e = 8$ (quarter-filling) では、 $t'$  が  $t$  に近い時、ある  $U_C$  が存在して、その  $U_C$  で常磁性からフラットバンド強磁性へ転移する。更に、 $t' > t$  の領域の常磁性相に関しては、charge stripe 型の電子配置が基底状態となることがスピン相関関数の振る舞いから示唆されるという結果を得た。 $N_e = 16$ (half-filling) では、 $t' < t$  では常磁性相から反強磁性相、 $t' > t$  では常磁性相から spin stripe 相へのクロスオーバーが、スピン相関関数の振る舞いから予想される (図 4)。

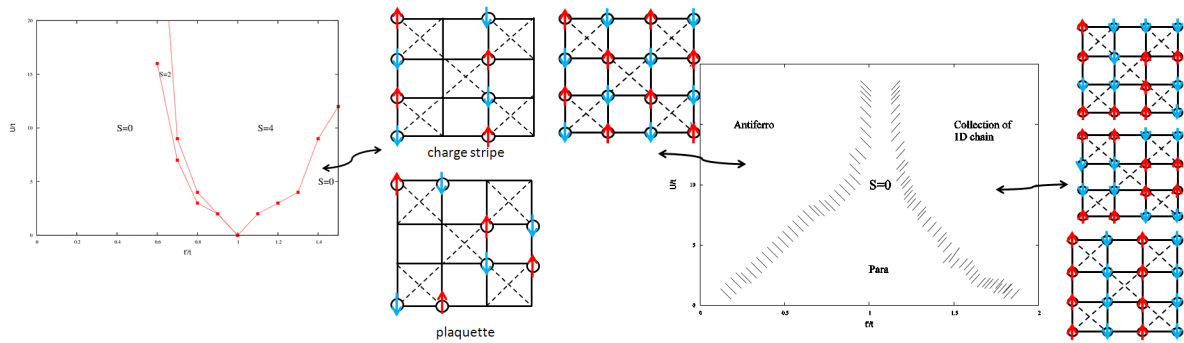


図3  $Ne = 8$ (左),  $16$ (右) の  $t' - U$  の相図

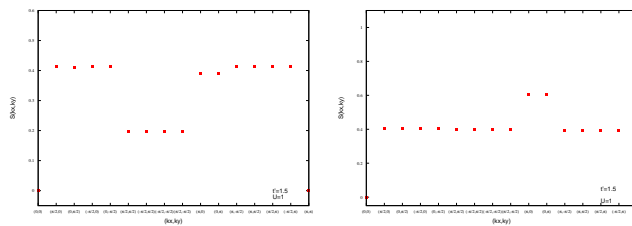


図4  $Ne = 8$ (左),  $16$ (右) のスピン相関関数

## 4 結論・今後の課題

フラットバンド強磁性が出現するチェッカーボード格子に関して、 $N = 8, 16$  の格子上的ハバードモデルに対して数値対角化を行い、quarter-filling、half-filling におけるスピン相関関数の計算結果から系の基底状態の性質を調べた。その結果、特に  $t' > t$  の領域で、quarter filling では、charge stripe 型または plaquette 型の電子配置が、half-filling では 1 次元の chain の集合としての状態となり、その縮退した状態の中で spin stripe 相がやや強く現れていることを示唆する結果が得られた。また、その他の filling、フラストレーションの強さ  $t'$ 、そして相互作用  $U$  を変化させたときの基底状態の相図、スピン相関関数についても数値対角化による計算を行った。今後の課題としては、常磁性から Mielke の強磁性への転移点の近傍での基底状態の振る舞いを更に詳細に求めること、quarter-filling、half-filling 以外の filling での基底状態に関して有限サイズ効果を越えた性質について議論すること等がある。

### 参考文献

- [1] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276** 238 (1963).
- [2] Nagaoka Y Phys. Rev. **147** 392 (1966).
- [3] Thouless D Proc. Phys. Soc. **86** 893 (1965).
- [4] A. Mielke, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, L73 (1991); **24**, 3311 (1991).
- [5] K. Kusakabe and H. Aoki, Physica B **194 - 196** 215 (1994).