

東京大学 大学院新領域創成科学研究科  
基盤科学研究系物質系専攻

平成 22 年度

修士論文

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

2011 年 1 月 25 日提出  
指導教員：上田 和夫 教授

47 - 096018 : 河室 佑貴

# 目次

1	序論	1
2	ハミルトニアン	3
2.1	チェッカーボード格子上のハバードモデル . . . . .	3
2.2	Mielke の定理 . . . . .	6
3	手法	12
3.1	Hartree Fock 近似での帯磁率 . . . . .	12
3.2	8 サイト系における数値対角化 . . . . .	15
3.3	16 サイト系における数値対角化 . . . . .	16
4	結果	19
4.1	相互作用が無い場合の感受率 . . . . .	19
4.2	8 サイト系に対する数値対角化の結果 . . . . .	24
4.3	16 サイト系に対する数値対角化の結果 . . . . .	25
5	quarter-filling、half-filling の基底状態	42
5.1	quarter-filling について . . . . .	42
5.2	half-filling について . . . . .	42
6	結論	44
付録 A	グラフ理論の基本的な用語について	45

# 1 序論

金属強磁性の問題は、これまで長い間盛んに議論されてきた。しかし、理論的な研究に関しては未だ理解が不十分な部分が多いというのが現状である。一般に磁性に関しては電子相関が本質的な問題となる。電子相関の物理を内包した有効なモデルとして、ハバードモデルがある [1] ~ [3]。ハバードモデルにおける強磁性を考察する際の出発点として、ハートリー・フォック近似にもとづく Stoner 理論がある [1]。この理論によると、強磁性の出現の条件は  $U\rho(\epsilon_F) \geq 1$  ( $U$ : onsite のクーロン相互作用の大きさ,  $\rho(\epsilon_F)$ : フェルミ面での状態密度) となり、 $U\rho(\epsilon_F)$  が 1 を越えた時に強磁性が出現する。しかし、Stoner 理論は強磁性の安定性を過大評価しており、実際は強磁性状態と常磁性状態はこれよりももっと競合しているということが知られている。

そこで、前述したように強磁性の発現には電子相関が本質的な役割を果たしているということ踏まえて、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どうか問題となる。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は、以下の 2 例の場合は厳密に示されている。1 つめは長岡の強磁性 [4][5] である。これは、クーロン相互作用が無限大で、かつ電子数が half-filling から 1 つ少ない場合に生じる。長岡強磁性の正孔のドーピング量が熱力学的に有限である場合の安定性の議論は様々な手法で行われているが、未だ完全に決着はしていない ([6] ~ [9])。2 つめは、Mielke, Tasaki ([10] ~ [13]) のフラットバンド強磁性である。この強磁性は、格子の構造を調節し、波数に依存しないフラットバンドを作りフェルミ面上にバルクの大きさの縮退を作ることによって出現する。フェルミ面上の多数の電子がクーロン相互作用によるエネルギーの上昇を回避するためにスピンを揃えるのである。この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 [14]。また、幾何学的フラストレーションを持つ強相関係の物質の典型的な例としてはパイロクロア物質があり、様々な実験により調べられている [15] [16]。そして、2 次元版のパイロクロア格子であるチェッカーボード格子における、フラストレーションの影響が、half-filling でのハバードモデルについて Yoshioka, Koga, Kawakami によって議論されている [17][18]。

本研究では、フラストレーション系の磁気秩序について、チェッカーボード格子上のハバードモデルに基づいて、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、数値対角化を用いて議論する。

2 章では、チェッカーボード格子上のハバードモデルを導入する。その際、quarter-filling 以下で特に最近接のホッピングと対角線のホッピングが等しい場合には、Mielke の定理が成立し、強磁性基底状態が存在することの証明を要約する (証明に必要なグラフ理論の基礎に関しては、付録 A に載せる)。3 章では今回用いた手法である Hartree-Fock 近似、実空間での数値対角化、波数空間での sublattice 構造を利用した数値対角化に関して述べる。4 章では、相互作用が無い場合の感受率と数値対角化による基底状態の相関とスピン相関関数の計算結果を載せ

る。5章では、4章での結果を受けて、quarter-filling、half-fillingの結果について詳細に議論する。そして6章で本研究の結論をまとめる。

## 2 ハミルトニアン

### 2.1 チェッカーボード格子上的ハバードモデル

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) 上のハバードモデルを考える。このモデルのハミルトニアンは以下で表される。

$$\begin{aligned} H &= H_K + H_{int} \\ &= \sum_{(im,jm'),\sigma} t_{imjm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{jm'\sigma} + U \sum_{im} n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 $c_{im\sigma}^\dagger$  ( $c_{im\sigma}$ ) は生成 (消滅) 演算子であり、副格子  $m (= A, B)$  の  $i$  番目の格子で、スピン  $\sigma$  の電子に対してのものである。 $i, j$  の和は、格子上で線が引かれている部分についてとる。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。そして  $t_{imjm'}$  は

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

である。今回は half-filling 以下でフラットバンド強磁性を議論するため、Mielke のモデルに対して particle-hole transformation を行い、 $t, t' \geq 0$  とする。

このハミルトニアンの  $H_K$  について、フーリエ変換

$$c_{im\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}m\sigma}, \quad c_{im\sigma}^\dagger = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}m\sigma}^\dagger \quad (3)$$

を行い、運動量空間へ移行すると、

$$\begin{aligned} H_K &= \sum_{(im,jm'),\sigma} t_{imjm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{jm'\sigma} \\ &= \sum_{(im,jm'),\sigma} t_{imjm'} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'m'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}m\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i + i\mathbf{k}'\mathbf{R}_j} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( t' \sum_{\delta_1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\delta_1}} \right) c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( t \sum_{\delta_2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\delta_2}} \right) c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( t \sum_{\delta_3} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\delta_3}} \right) c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( t' \sum_{\delta_4} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\delta_4}} \right) c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{R}_{\delta_1} = a(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ ,  $-\mathbf{R}_{\delta_1} = -a(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ 、 $\mathbf{R}_{\delta_2} = \mathbf{R}_{\delta_3} = a\mathbf{e}_x$ ,  $-\mathbf{R}_{\delta_2} = -a\mathbf{e}_x$ ,  $a\mathbf{e}_y$ ,  $-\mathbf{R}_{\delta_4} = -a\mathbf{e}_y$ 、

$a(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y)$ ,  $-a(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y)$  (図 1) より、

$$\begin{aligned}
H_K &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t' \cos(k_x + k_y)\} c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t(\cos k_x + \cos k_y)\} c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} \\
&+ \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t(\cos k_x + \cos k_y)\} c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t' \cos(k_x - k_y)\} c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} \quad (5) \\
&= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger & c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2t' \cos(k_x + k_y) & 2t(\cos k_x + \cos k_y) \\ 2t(\cos k_x + \cos k_y) & 2t' \cos(k_x - k_y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A\sigma} \\ c_{\mathbf{k}B\sigma} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

と表される。これは、副格子を用いた表示である。ここで、

$$A \equiv \begin{pmatrix} 2t' \cos(k_x + k_y) & 2t(\cos k_x + \cos k_y) \\ 2t(\cos k_x + \cos k_y) & 2t' \cos(k_x - k_y) \end{pmatrix} \quad (6)$$

を対角化することを考えると、固有値は、

$$\epsilon_\alpha(\mathbf{k}) = \begin{cases} \epsilon_1(\mathbf{k}) \\ \epsilon_2(\mathbf{k}) \end{cases} = \begin{cases} 2t' \cos k_x \cos k_y - 2\sqrt{t'^2(\sin k_x \sin k_y)^2 + t^2(\cos k_x + \cos k_y)^2} \\ 2t' \cos k_x \cos k_y + 2\sqrt{t'^2(\sin k_x \sin k_y)^2 + t^2(\cos k_x + \cos k_y)^2} \end{cases} \quad (7)$$

となる。よって、 $H_k$  は

$$H_K = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \alpha} \epsilon_\alpha(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \quad (8)$$

となり、バンド表示で対角的にすることができる。特に  $t' = t$  のときは、

$$\epsilon_\alpha(\mathbf{k}) = \begin{cases} \epsilon_1(\mathbf{k}) \\ \epsilon_2(\mathbf{k}) \end{cases} = \begin{cases} -2t \\ 2t(2 \cos k_x \cos k_y + 1) \end{cases} \quad (9)$$

となり、フラットバンドが現れる。今回のハバードモデル (1) には、 $\frac{1}{4}$ -filling 以下で、フラットバンドを起源とする強磁性基底状態が存在することが Mielke によって示されている。以下では、Mielke の定理について説明する。

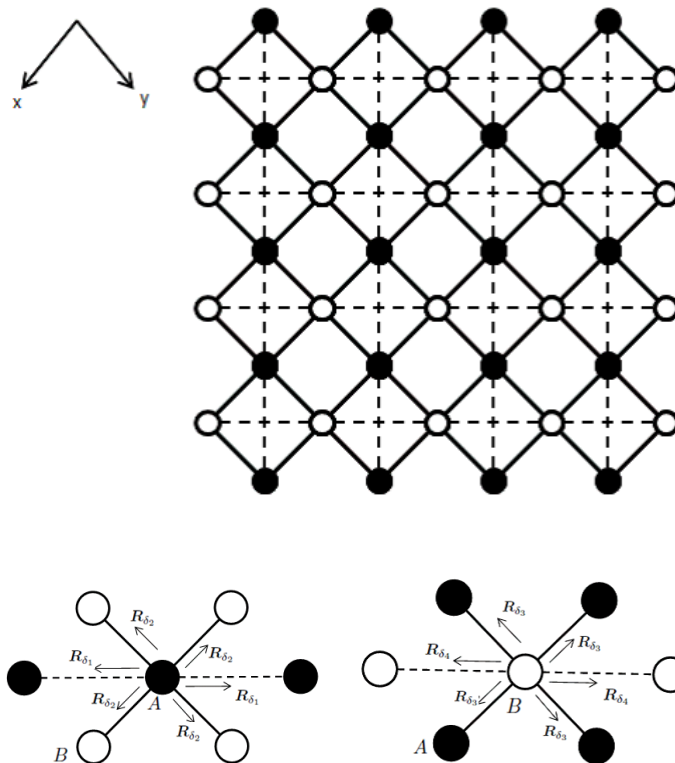


図1 チェッカーボード格子。これは、正方格子に点線のホッピングを加えたものになっている。実線のホッピングは  $t$ 、点線のホッピングは  $t'$  である。  $\blacksquare$  は副格子  $A$ 、  $\square$  は副格子  $B$  を表す。

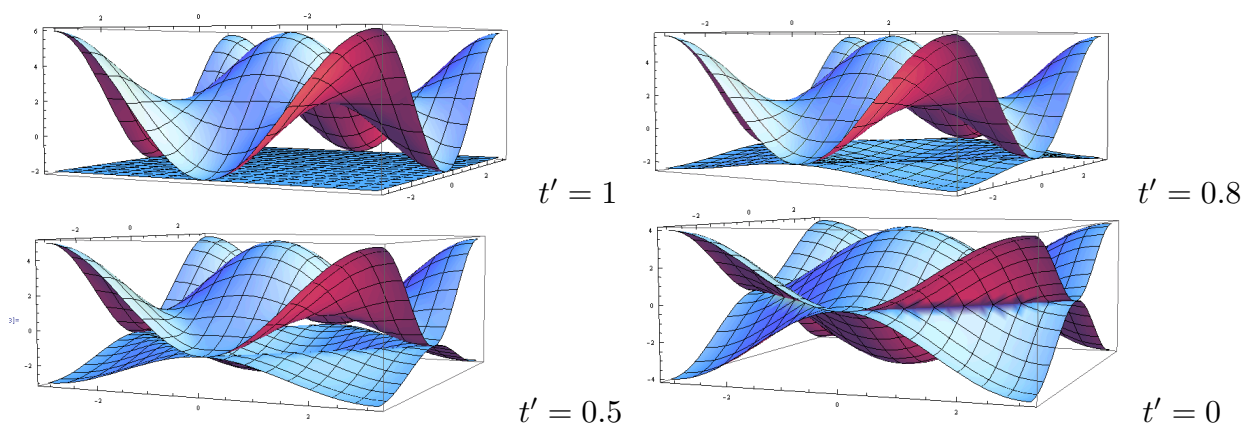


図2  $t'$  を変えた時の1電子のエネルギー分散関係

## 2.2 Mielke の定理

以下に証明の道筋を要約する。ここでは、グラフ理論を用いて、グラフ  $G = (V, E)$  のライングラフ  $L(G) = (V_L, E_L)$  上でのハバードモデル

$$H = - \sum_{v,v',\sigma} A_{vv'} c_{v\sigma}^\dagger c_{v'\sigma} + U \sum_v n_{v\uparrow} n_{v\downarrow} \quad (10)$$

が、強磁性基底状態をもつ時の条件について考える。グラフ理論の基礎的な内容については、付録 A に載せる (線形代数に関する用語や定理は、ここでは説明を省くので、必要に応じて教科書等を参照していただきたい)。ここで、 $V, E, V_L, E_L$  はそれぞれ  $G, L(G)$  の vertex と edge の集合であり  $|V|, |E|$  はそれぞれ vertex, edge の数を表すとする。ライングラフ  $L(G)$  とは、元のグラフ  $G$  について、 $V_L = E$  となるものである。また、 $G$  の 2 つの edge が共通の vertex を持っていた場合、 $V_L$  の 2 つの vertex は隣接するとする。ライングラフ構成の例を図 3 に示す。付録 A で定義した  $A_{vv'}$  は隣接行列であり、単純グラフならば  $A_{vv'} = 0$  or  $1$  である。

更に  $G$  の接続行列  $B(G)$  を導入する。 $B(G) = (B_{ve})_{v \in V, e \in E}$  であり、 $B_{ve}$  は vertex  $v$  と edge  $e$  が接続していれば 1、その他は 0 となる。 $L(G)$  の隣接行列  $A_L$  は  $G$  の接続行列  $B(G)$  と以下の関係がある。

$$B^t(G)B(G) = 2I_{|E|} + A_L \quad (11)$$

$t$  は転置を表す。(11) より、 $B(G)$  の性質がわかれば  $A_L$  の性質がわかることになる。まず、この (11) を証明する。

[証明]

$B$  をグラフ  $G$  の接続行列として、 $B^t B$  を考える。

・対角成分について

$$\begin{aligned} (B^t B)_{e_i e_i} &= \sum_j (B^t)_{e_i v_j} (B)_{v_j e_i} \\ &= \sum_j (B)_{v_j e_i}^2 \\ &= \sum_j (B)_{v_j e_i} \\ &= 2 \end{aligned} \quad (12)$$

非対角成分について



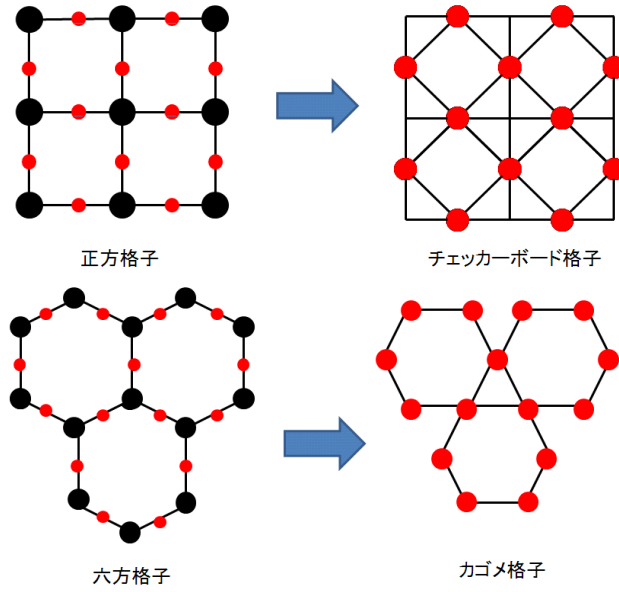


図3 ライングラフの構成の例。左:元のグラフ  $G$ 、右:ライングラフ  $L(G)$

$$\begin{aligned}
 (B^t B)_{e_i e_j (i \neq j)} &= \sum_k (B^t)_{e_i v_k} (B)_{v_k e_j} \\
 &= \sum_k (B)_{v_k e_i} (B)_{v_k e_j}
 \end{aligned} \tag{13}$$

となるが、 $(B)_{v_k e_i} (B)_{v_k e_j}$  は、edge  $e_i, e_j$  が共通の vertex  $v_k$  を持つときに 1、その他は 0 となる。これは、グラフ  $G$  に対するライングラフ  $L(G)$  における隣接行列  $A_L$  の定義そのものであるので、

$$(B^t B)_{e_i e_j} = (A_L)_{ij} \quad (i \neq j) \tag{14}$$

となる。そして、(12)、(13) と、 $(A_L)_{ii} = 0$  であることと併せると、

$$B^t B = 2I_{|E|} + A_L$$

となる。 [証明終]

$B(G)^t B(G)$  が非負正定値行列なので、 $B^t B$  の固有値  $\lambda$  が  $\lambda \geq 0$  となることより、(11) から、 $A_L$  の最低固有値  $a$  (縮退度を  $m(a)$  とする) は、 $a \geq -2$  となる。そして特に、 $A_L$  が最低固有値  $a = -2$  をとる場合、その固有空間は  $B(G)$  の核である。以上を考慮すると、以下が成立する。

- (a)  $G$  が tree または odd サイクルただ一つの場合、 $a \neq -2$  である。
- (b)  $G$  が bipartite<sup>\*1</sup> だが tree ではない場合、 $a = -2$  であり、その縮退度は  $m(-2) = |E| -$

<sup>\*1</sup> bipartite graph とは vertex の集合  $V$  を 2 つの部分集合に分割した時、その集合内の vertex を結ぶ edge がないようにできるグラフのことである

$|V| + 1$  である。

(c)  $G$  が bipartite でなくて、odd サイクルが 1 つのみであるグラフではない場合、 $a = -2$ ,  $m(-2) = |E| - |V|$  である。

(a) の証明

(a-1)  $G$  が tree の場合

tree における edge と vertex は、常に  $|E| = |V| - 1$  が成立している。そして、このグラフの接続行列  $B(G)$  に関して、1 つの edge  $e_j$  に着目すると、その edge は 2 つの vertex を結んでいるので、 $(B)_{v_i e_j} \neq 0$  となる vertex  $v_i$  は必ず 2 つある。ここで、 $G$  が tree の場合は、edge と vertex の番号の付け方によって  $(B)_{v_i e_j} \neq 0$  となる  $i, j$  に関して、1 つを  $i = j$ 、もう 1 つを  $i > j$  とすることができる (図 4)。これより接続行列が以下の形で表される。

$$B(G) = \begin{pmatrix} B'(G) \\ b \end{pmatrix} \quad (15)$$

ここで、 $b$  は成分が 0 か 1 の行ベクトルであり、 $B'(G)$  は  $|E| \times |E|$  の行列で、対角成分が 1、上三角を 0、下三角を 0 または 1 である。 $B'$  は正則なので、 $\text{rank}(B^t B) = \text{rank} B' = |E|$  である。

一般に  $f: V \rightarrow W, f(\mathbf{a}) = A\mathbf{a}$  とし、

$$\begin{aligned} \text{Im} f &\equiv \{ \mathbf{b} \in W \mid f(\mathbf{a}) = \mathbf{b} \text{ となる } \mathbf{a} \in W \text{ が存在する} \} \\ \text{Ker} f &\equiv \{ \mathbf{a} \mid f(\mathbf{a}) = \mathbf{0} \} \end{aligned} \quad (16)$$

とすると、

$$\begin{aligned} \dim V - \dim(\text{Im} f) &= \dim(\text{Ker} f) \\ \dim(\text{Im} f) &= \text{rank} A \end{aligned} \quad (17)$$

が成立するので、

$$\dim(\text{Ker} f) = \dim V - \text{rank} A \quad (18)$$

となる。今回は、 $f(\mathbf{a}) = (B^t B)\mathbf{a}$  とすると、 $\dim(\text{Ker} f) = |E| - |E| = 0$  である。よって、 $a \neq -2$  である。

(a-2)  $G$  が odd サイクルただ一つをもつ場合

$G$  を長さ  $l$  (odd) の 1 つのサイクルを含むような tree とすると、 $B$  は

$$B(G) = \begin{pmatrix} B_l & X \\ O & B'' \end{pmatrix} \quad (19)$$

と書ける (図 5)。ここで、 $B_l$  は長さ  $l$  のサイクルの接続行列であり、正則である。 $B''$  は  $(|V| - l) \times (|V| - l)$  の行列で、(a-1) の  $B'$  と同様の議論から、正則である。 $X$  は  $l \times (|V| - l)$  の行列で成分は 0 または 1 である。 $O$  は  $(|V| - l) \times l$  のゼロ行列である。こうすると  $\text{rank}(B^t B) = |E|$

であるので、(a-1) と同様に  $a \neq -2$  となる。

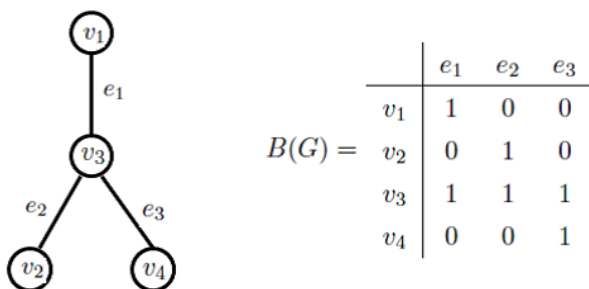


図 4 (a-1) のグラフ  $G$  の例

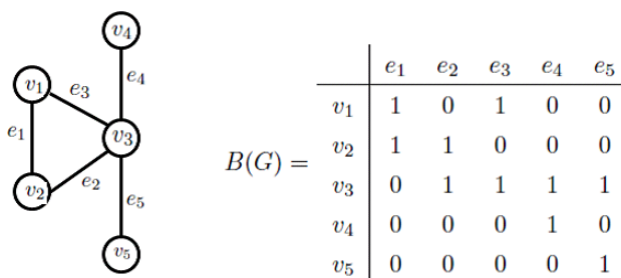


図 5 (a-2) のグラフ  $G$  の例

### (b) の証明

bipertite なグラフ  $G$  を副格子  $A$  と  $B$  に分け、それぞれの vertex の集合を  $V_A$  と  $V_B$  とする。edge は副格子間に引かれることになるので、 $V_A$  から  $V_B$  に向かわせる。それに対応し、 $|V| \times |V|$  の行列  $S$  を考える。 $S$  は、 $S_{v_i v_j} = s_{v_i} \delta_{v_i, v_j}$

$$s_{v_i} = \begin{cases} 1 & (\text{if } v_i \in V_A) \\ -1 & (\text{if } v_i \in V_B) \end{cases} \quad (20)$$

である。 $D = SB$  は edge の向きを考慮した接続行列である。まず、この  $D$  の rank について考える。グラフ  $G$  が bipertite であることより、任意の 1 つの edge  $e_i$  を見ると、必ず副格子  $A$  に属する vertex から  $B$  に属する vertex へ向かっている。よって、全ての  $e_i$  において

$$(B)_{v_j e_i} = 1, \quad (B)_{v_j' e_i} = -1 \quad (21)$$

となる  $v_j, v_{j'}$  が1つずつ存在する。これを考えると、 $D = [d_1 \ d_2 \ \cdots \ d_{|V|}]^t$  とした時に、

$$\sum_{i=1}^{|V|} d_i = 0 \quad (22)$$

となる。これより、 $d_{|V|} = -(d_1 + d_2 + \cdots + d_{|V|-1})$  が成立するので、

$$D = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_{|V|-1} \\ -(d_1 + d_2 + \cdots + d_{|V|-1}) \end{pmatrix} \quad (23)$$

となり、 $\text{rank} D = \text{rank} B = |V| - 1$  である (図 6)。更に  $D^t D = B^t S^t S B = B^t B$  となるので、(a) と同様に  $f(\mathbf{a}) = (B^t B)\mathbf{a}$  とすると、 $\dim(\text{Ker} f) = |E| - \text{rank} D = |E| - |V| + 1$  となる。よって、 $B^t B \mathbf{x} = 0 \mathbf{x} \Rightarrow A_L \mathbf{x} = -2 \mathbf{x}$  ( $a = -2$ ) となる  $\mathbf{x}$  が存在し、その空間の次元は  $m(-2) = |E| - |V| - 1$  である。

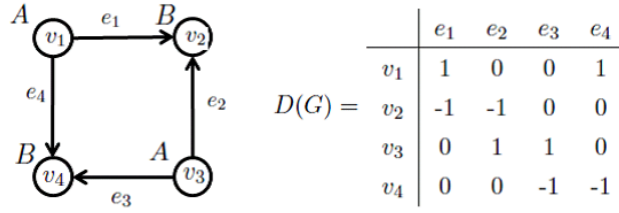


図 6 (b) のグラフ  $G$  の例

### (c) の証明

$G'$  を  $G$  の spanning tree<sup>\*2</sup> とする。この  $G'$  は odd サイクルが1つ含まれるようにとる (図 7)。このようにすると (a) より、 $G'$  の接続行列  $B'(G')$  が正則であることが示されている。したがって、今回の接続行列  $B(G)$  は、 $|V| \times |V|$  の正則な行列を含んでいる。よって、 $\text{rank} B(G) = \text{rank} B'(G') = |V|$  である。したがって、(a)、(b) と同様の議論から、 $A_L$  の固有値  $a = -2$  の縮退度は  $m(-2) = |E| - |V|$  である。

以上をふまえて、ライングラフ上のハバードモデルを考える。 $G$  が bipartite かまたは、少なくとも2つの odd サイクルを持つと仮定する。今回の研究と併せて考えるために、particle-hole transformation

$$b_{v\sigma}^\dagger = c_{v\sigma}, \quad b_{v\sigma} = c_{v\sigma}^\dagger \quad (24)$$

<sup>\*2</sup>  $G$  の spanning tree とは、 $G$  の全域部分グラフで、同時に tree であるもののことである

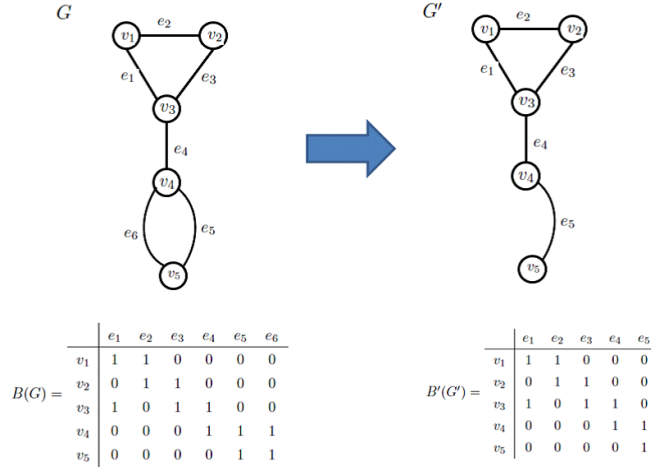


図7 (c) のグラフ  $G, G'$  の例

を行う。定数エネルギーシフトの後、ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \sum_{v, v', \sigma} A_{vv'} b_{v\sigma}^\dagger b_{v'\sigma} + U \sum_v n_{v\uparrow} n_{v\downarrow} \quad (25)$$

となる。これによって運動エネルギーと、スピン演算子の符号は変わるが、total spin の符号は変わらない。そして、 $\sum_{v\sigma} b_{v\sigma}^\dagger b_{v\sigma} = N_e$  と考えると、1 粒子の運動エネルギーの期待値が  $-2$  以上で、かつ相互作用項の期待値は正なので、 $\mathcal{H}$  の固有値は  $-2N_e$  以上である。そして、particle-hole transformation によってスピンの不変であることと、隣接行列の対角和が 0 であることから、以下が成立する。

### 定理

$L(G) = (V_L, E_L)$  を connected graph  $G = (V, E)$  のライングラフとし、

$$M = \begin{cases} |E| - |V| + 1 & (\text{if } G \text{ が bipartite}) \\ |E| - |V| & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (26)$$

とする。 $L(G)$  上のハミルトニアン (25) は、 $N_e \leq M$  では、total spin  $S = \frac{1}{2}N_e$  で、エネルギー  $-2N_e$  の強磁性基底状態をもつ。

ex.  $G$ : 正方格子、 $L(G)$ : チェッカーボード格子の場合

正方格子は bipartite なので  $m(-2) = |E| - |V| + 1$  であり、 $|V| = \frac{1}{2}|E|$  となるので、 $M = \frac{1}{2}|E| + 1 = \frac{1}{2}|V_L| + 1$  となる。これにより、 $N_e \leq \frac{1}{2}|V_L|$  のとき、 $S = \frac{1}{2}N_e$  の強磁性基底状態をもつ。

### 3 手法

ハミルトニアン (1) について、Hartree Fock 近似、8、16 サイト系における数值的対角化を行い、結果を比較する。なお、16 サイト系における数值的対角化については計算時間と、メモリに関してのいくつかの工夫を述べておく。

#### 3.1 Hartree Fock 近似での帯磁率

ハミルトニアン (1) に対して、Hartree Fock 近似を行い、基底状態における帯磁率を計算する。

このハミルトニアンを全格子点を等価と考えた表示に書きなおし、

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{(i,j),\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \\
 &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \\
 &\left( c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i c_{i\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}, \quad \epsilon(\mathbf{k}) = \sum_\delta t_{i,i+\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta} \right)
 \end{aligned} \tag{27}$$

に対して、磁気秩序を考える。そのため、スピン密度波の振幅  $M_Q$  の関数として自由エネルギーを表すことを考える。まず、空間的に変化する仮想磁場  $h_i$  を導入し、そのスピン密度との相関を求めて、1 電子ハミルトニアンを書く。 $h_i$  とサイト毎のスピン  $S_i$  をフーリエ変換すると、

$$\begin{aligned}
 h_i &= \sum_q h_q e^{iq\cdot R_i} \quad (h_q = h_{-q}^*) \\
 S_i &= \sum_q S_q e^{iq\cdot R_i}
 \end{aligned} \tag{28}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 S_q^+ &= \sum_k c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \\
 S_q^- &= \sum_k c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \\
 S_q^z &= \frac{1}{2} \sum_k (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow})
 \end{aligned} \tag{29}$$

である。このようにすると、スピン密度と磁場との相互作用は、

$$H_{ex} = \sum_i S_i \cdot h_i = \sum_q S_{-q} \cdot h_q \tag{30}$$

次に、波数  $Q$  で指定される回転外部磁場、

$$h_i^x = h_Q \cos(Q \cdot R_i), \quad h_i^y = h_Q \sin(Q \cdot R_i) \tag{31}$$

を考える。この各成分をフーリエ逆変換して

$$\mathbf{h}_Q = \frac{1}{2}h_Q(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y), \quad \frac{1}{2}h_{-Q}(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y) \quad (32)$$

として、(30) に代入し、スピン密度と磁場との相互作用を求めると、

$$\begin{aligned} H_{ex} &= \mathbf{S}_Q \cdot \mathbf{h}_{-Q} + \mathbf{S}_{-Q} \cdot \mathbf{h}_Q \\ &= S_Q^x h_{-Q}^x + S_Q^y h_{-Q}^y + S_{-Q}^x h_Q^x + S_{-Q}^y h_Q^y \\ &= \frac{1}{2} (S_Q^+ + S_{-Q}^-) h_Q \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}) h_Q \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}) h_Q \end{aligned} \quad (33)$$

となり、これよりスピン密度との相関を含めた、1 電子ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + H_{ex} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}) h_Q \end{aligned} \quad (34)$$

となる。以下でこれをカノニカル変換する。このハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & \frac{1}{2}h_Q \\ \frac{1}{2}h_Q & \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_k^\dagger \Lambda_k \mathbf{C}_k \\ &\left( \mathbf{C}_k^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \Lambda_k = \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & \frac{1}{2}h_Q \\ \frac{1}{2}h_Q & \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \end{pmatrix} \right) \end{aligned} \quad (35)$$

と書くことができる。この  $\Lambda_k$  を対角化する直交行列を  $P_k = (p_1 \ p_2)$  とする。ただし  $p_n$  は  $\Lambda_k$  の固有ベクトルであり、以下の固有値方程式を満たす。

$$\begin{aligned} \Lambda_k p_1 &= E_{1k} p_1, \quad \Lambda_k p_2 = E_{2k} p_2 \\ E_{1k} &= \frac{1}{2} \left\{ (\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q})) \pm \sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q}))^2 + h_Q^2} \right\} \end{aligned} \quad (36)$$

この  $P_k$  を用いて、

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_k &= P_k \mathbf{A}_k \\ \mathbf{A}_k &= \begin{pmatrix} a_{1k} \\ a_{2k} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (37)$$

として、1 電子ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}}^\dagger \Lambda_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^\dagger P_{\mathbf{k}}^{-1} \Lambda_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \Lambda'_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \left( E_{1\mathbf{k}} a_{1\mathbf{k}}^\dagger a_{1\mathbf{k}} + E_{2\mathbf{k}} a_{2\mathbf{k}}^\dagger a_{2\mathbf{k}} \right) \\
&\quad \left( \Lambda'_{\mathbf{k}} = P_{\mathbf{k}}^{-1} \Lambda_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} E_{1\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & E_{2\mathbf{k}} \end{pmatrix} \right)
\end{aligned} \tag{38}$$

と対角化される。スピン密度波の振幅  $S_{\mathbf{Q}} = \langle S_{\mathbf{Q}}^+ \rangle = \langle S_{-\mathbf{Q}}^- \rangle = M_{\mathbf{Q}}$  の関数として、自由エネルギー  $F_0$  は、

$$\begin{aligned}
F_0(M_{\mathbf{Q}}, T) &= \Omega_0(\mu, M_{\mathbf{Q}}, T) + \mu N \\
\Omega_0(\mu, M_{\mathbf{Q}}, T) &= -T \sum_{n=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left\{ 1 + e^{-\frac{(E_{n\mathbf{k}} - \mu)}{T}} \right\} + M_{\mathbf{Q}} h_{\mathbf{Q}}
\end{aligned} \tag{39}$$

となる。ここで  $\Omega_0$  は、相互作用のない系での熱力学ポテンシャルであり、

$$-\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} = N_e, \quad \frac{\partial \Omega_0}{\partial h_{\mathbf{Q}}} = 0 \tag{40}$$

が成立する。(40) を具体的に書き下すと、

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1,2} \sum_{\mathbf{k}} f(E_{n\mathbf{k}}) &= N_e \\
-\frac{1}{2} \sum_{n=1,2} \sum_{\mathbf{k}} (-1)^n f(E_{n\mathbf{k}}) h_{\mathbf{Q}} \left[ (\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}))^2 + h_{\mathbf{Q}} \right]^{-1/2} &= M_{\mathbf{Q}} \\
f(x) &= \frac{1}{1 + e^{(x-\mu)/T}}
\end{aligned} \tag{41}$$

$U = 0$  の相互作用のない系に対する波数依存の帯磁率  $\chi_0$  は、一般の  $\mathbf{q}$  に対して、

$$\begin{aligned}
\chi_0(\mathbf{q}) &= \left( \frac{M_{\mathbf{q}}}{h_{\mathbf{q}}} \right)_{h_{\mathbf{q}} \rightarrow 0} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})) - f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k})}
\end{aligned} \tag{42}$$

となる。

一方、クーロン相互作用は、Hartree Fock 近似により、

$$(H_{int})_{HF} = I \left( \frac{1}{4} N_e^2 - M_{\mathbf{q}}^2 \right) \quad \left( I \equiv \frac{U}{N} \right) \tag{43}$$

となることを用いて、Hartree Fock 近似での自由エネルギーは

$$F_{HF} = F_0(M_{\mathbf{q}}, T) + I \left( \frac{1}{4} N_e^2 - M_{\mathbf{q}}^2 \right) \tag{44}$$



この  $F_{HF}$  に対しての、熱平衡条件は

$$\begin{aligned}\frac{\partial F_{HF}}{\partial M_{\mathbf{q}}} &= 0 \\ \implies h_{\mathbf{q}} - 2M_{\mathbf{q}}I &= 0\end{aligned}\quad (45)$$

これと、(41) より、 $M_{\mathbf{q}}$  に対する自己無撞着方程式を得る。

また、Hartree Fock 近似での帯磁率  $\chi_{HF}$  は

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 F_{HF}}{\partial M_{\mathbf{q}}^2} &= \frac{1}{\chi_{HF}(\mathbf{q})} \\ \implies \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q})} - 2I &= \frac{1}{\chi_{HF}(\mathbf{q})} \\ \implies \chi_{HF}(\mathbf{q}) &= \frac{\chi_0(\mathbf{q})}{1 - 2I\chi_0(\mathbf{q})}\end{aligned}\quad (46)$$

となる。これより、スピン密度波の出現条件は

$$2I\chi_0(\mathbf{q}) > 1 \quad (47)$$

となる。本研究では、絶対零度において (42) を数値的に計算する。

その際  $\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k}) = 0$  の時、 $\chi_0(\mathbf{q})$  は特異的であり、その時は

$$\frac{f(\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})) - f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k})} \rightarrow \frac{\partial f(\epsilon(\mathbf{k}))}{\partial \epsilon(\mathbf{k})} = \frac{1}{4T} \frac{1}{\left[\cosh\left(\frac{1}{2T}(\epsilon - \mu)\right)\right]^2} \quad (48)$$

として計算を行う。

### 3.2 8 サイト系における数値対角化

8 サイト系に対しては、実空間表示 (1) に対して、ハウスホルダ変換を行い、対角化を行う。得られた結果から、基底状態に対してスピン相関

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (49)$$

を計算する。ここで、 $i, j$  の和は、全ての格子点についてとり、 $\mathbf{q}$  は全格子点を等価と考えた時の、第一ブリルアンゾーン内の  $N$  個の  $\mathbf{k}$ -点について定義される。 $\langle \dots \rangle$  は基底状態での期待値である。もし、基底状態が縮退している場合、縮退している状態についての期待値の相加平均をスピン相関関数の定義とする。ただし、縮退している中に  $S = S_{max}$  の強磁性状態が基底状態に存在する場合は、その強磁性状態での期待値の相加平均を定義とする。

### 3.3 16 サイト系における数値対角化

16 サイトの数値的対角化については、ランチョス法を用いて行う。今回の計算は、total  $S^z = 0$  の部分空間に関して行う。その際に、実空間の表示で行おうとすると、例えば half-filling の時には、ハミルトニアン of total  $S^z = 0$  の部分空間の次元は、約  $10^8$  となり、この行列の非ゼロの要素をすべてコンピュータに記憶するためには、次元の 2 乗に比例したメモリが必要となり、更に、ランチョス法を行う際の 3 重対角行列を生成するために必要な状態ベクトルも併せると、結局対角化を行うために必要とされるメモリがとても大きなものとなり、行列ベクトル積にかかる時間も要素数が多いため大きなものになってしまう。そこで、ハミルトニアンを波数表示で表して対角化を行う。運動エネルギーの他に、クーロン相互作用の項についてもフーリエ変換を行うと、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t' \cos(k_x + k_y)\} c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t(\cos k_x + \cos k_y)\} c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} \\
 & + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t(\cos k_x + \cos k_y)\} c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{2t' \cos(k_x - k_y)\} c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} \\
 & + \frac{2U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}'} \left[ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'A\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'A\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'A\downarrow} c_{\mathbf{k}A\uparrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'B\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'B\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'B\downarrow} c_{\mathbf{k}B\uparrow} \right]
 \end{aligned} \quad (50)$$

と書ける。このハミルトニアンを行列表示すると、その行列は系の並進対称性から、全運動量毎の部分空間に分けることができる。これにより、部分空間毎の対角化を行うことで、対角化すべき行列の次元を約  $1/8$  にすることができる。

ここで、(50) をバンド表示にして対角化することを考えると、運動量の項は対角的になるが、クーロン相互作用の項がバンド間をまたぎ、行列要素が散らばるようになって非ゼロの行列要素の数が多くなるため、要素を記憶させることが難しくなる。

そこで、今回は (50) を副格子の表示で対角化する。この表示には以下の特徴がある。

- (a)  $t'$  でホッピングする項は、全て対角成分になる。
- (b)  $t$  でホッピングする項は、異なる副格子間で起こるが、その際に運動量を変えない。
- (c) クーロン相互作用で散乱する項は運動量の変化を伴うが、同一の副格子内でおこる。

これらの特徴と、up(down) スピンを持つ電子数  $N_{\uparrow(\downarrow)}$  について  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$  であることを用いると、今回の多電子状態の基底を  $|A_{\uparrow}\rangle|B_{\uparrow}\rangle|A_{\downarrow}\rangle|B_{\downarrow}\rangle$  という空間毎に分けると便利である。ここで、

$$|m_{\sigma}\rangle = c_{\mathbf{k}_1 m \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 m \sigma}^\dagger \cdots |vac\rangle \quad (51)$$

である。この基底を用いて、スピン  $\sigma$  の電子で副格子  $m$  に属している電子数  $N_{m\sigma}$  に着目し基底を並べ替えてハミルトニアンを表すと以下のようにブロックに分けて表すことができる。

$H =$

	[AA...A] [AA...A]	[AA...A] [AA...B]	...	[AA...B] [AA...A]	...	[BB...B] [BB...B]
[AA...A] [AA...A]	$U, t'$	$t_{\downarrow}$	...	$t_{\uparrow}$	...	$O$
[AA...A] [AA...B]	$t_{\downarrow}$	$U, t'$	...	$O$	...	$O$
...	...	...	...	...	...	...
[AA...B] [AA...A]	$t_{\uparrow}$	$O$	...	$U, t'$	...	$O$
...	...	...	...	...	...	...
[BB...B] [BB...B]	$O$	$O$	...	$O$	...	$U, t'$

ここで、1つのブロックに対して、左側の [ ] は up スピンの電子が属している副格子、右側の [ ] は down スピンの電子が属している副格子を表している。このように表示すると、初めから行列要素が非ゼロであるブロックが特定できるので、計算時間の短縮をすることができる。

更に、対角ブロックのクーロン相互作用の行列要素について、(c) の性質を用いると、ある多電子状態について、クーロン相互作用による散乱は副格子を保存するので、例えば副格子  $B$  の電子状態は変化せず、 $A$  の電子状態のみが散乱の前後で変化するという事を利用し、副格子ごとの散乱の情報を

$$\begin{aligned}
 (\hat{U}_m^{block})_{ij} &= \langle m_i^{block} | \hat{U}_m | m_j^{block} \rangle \\
 |m_i^{block}\rangle &= |m_{\uparrow}^{block}\rangle_i |m_{\downarrow}^{block}\rangle_i
 \end{aligned}
 \tag{52}$$

としてブロックごとに行列形式でコンピュータに記憶するという方法を用いる。これにより、 $U$  の行列要素を全て格納する必要がなくなり、メモリの大幅な節約が可能となる。

以上を考慮して、今回のランチョス法の計算の概要を表に表すと下のようになる。

$N_e$	全運動量 $\mathbf{K} = (0, 0)$ の部分空間の次元	行列・ベクトル積 1 回にかかる時間 [s]	$\hat{U}_{A(B)}$ で使うメモリ量	ホッピングの非ゼロの要素数
4	1824		980[kB]	2160
6	39200	0.02	50[MB]	63700
8	414352	0.6	500[MB]	829440
10	2384328	6	1[GB]	5465460
12	8017184	32	1.3[GB]	20046320
14	16359200	85	1.3[GB]	42942900
16	20706468	120	1.3[GB]	55223040

ここで、注目すべきことは、 $N_e = 12, 14, 16$  となるにつれて、 $\hat{U}_{A(B)}$  で使用するメモリ量が約 1.3[GB] で抑えられていることである。

例えばハミルトニアン行列の対角ブロックごとの  $\hat{U}_A^{block}$  の次元について考えると、この次元は、副格子  $A$  に関する電子配置の場合の数の大きさに依存する。系の中で  $A$  副格子の数は  $N/2$  であるので、最も次元の大きな  $\hat{U}_A^{block}$  は

$$\dim \hat{U}_{Amax}^{block} = (N/2 C_{N/4})^2 \quad (53)$$

であり、 $N = 16$  では  $\dim \hat{U}_{Amax}^{block} = 4900$  となり、このオーダーの次元をもつ行列がメモリ使用量に対して主要な寄与をする。そこで、各 filling において、 $\dim \hat{U}_A^{block} > 3000$  となるブロックの個数を表にすると下のようになる。

$N_e$	$\dim \hat{U}_A^{block} > 3000$ となる ブロックの個数
4	0
6	0
8	3
10	8
12	9
14	9
16	9

これにより、 $N_e = 8$  から  $\dim \hat{U}_A^{block} > 3000$  となる  $\hat{U}_A^{block}$  が現れて、half-filling に至るまでの間で、その数は増えるが最大値は 9 に抑えられていることが分かる。副格子  $B$  についても同様である。

以上のような手法で、ハミルトニアンを対角化し、基底状態に関して、

$$\begin{aligned} R^1(\mathbf{p}) &\equiv \frac{1}{N} \sum_i \sum_l \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+l} \rangle e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_l} = R^{AA}(\mathbf{p}) + R^{BB}(\mathbf{p}) \\ R^2(\mathbf{p}) &\equiv \frac{1}{N} \sum_i \sum_l \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+l+\delta} \rangle e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}_l + \mathbf{R}_\delta)} = R^{AB}(\mathbf{p}) + R^{BA}(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (54)$$

を計算する。ここで、 $\mathbf{R}_l$  は同一副格子内を結ぶベクトルであり、 $l$  の和は、副格子内全ての点についてとる。 $i$  の和は、全ての格子点についてとる。 $\mathbf{R}_\delta$  は副格子間を結ぶベクトルで、 $\mathbf{R}_\delta = a(1, 0)$  とする。副格子を利用した計算では、ブリルアンゾーンは、折りたたまれたものとなっている。この折りたたまれたゾーンを reduced zone と定義すると、ここでの  $R^1(\mathbf{p})$ ,  $R^2(\mathbf{p})$  は reduced zone 内の  $N/2$  個の  $k$ -点について定義される。この  $R^1(\mathbf{p})$ ,  $R^2(\mathbf{p})$  と、前節で定義した、全格子点を等価とした時のブリルアンゾーン内での相関関数  $S(\mathbf{q})$  との対応は以下のようになる。もとのブリルアンゾーンでのスピン相関との関係を求めておく。

$$S(\mathbf{q}) = \begin{cases} R^1(\mathbf{p}) + R^2(\mathbf{p}) & (\text{if } \mathbf{q} \in \text{reduced zone}) \\ R^1(\mathbf{p}) - R^2(\mathbf{p}) & (\text{if } \mathbf{q} \notin \text{reduced zone}) \end{cases} \quad (55)$$

$N = 8$  での計算と対応させるため、この  $S(\mathbf{q})$  を用いて結果を考察する。

## 4 結果

### 4.1 相互作用が無い場合の感受率

チェッカーボード格子の1電子の状態密度のふるまいをいくつかの $t'$ について描くと図8のようになる。ただしこの図は $t = 1$ として計算したものである。これをみると、 $t' = t$ の時に $\epsilon = -2t$ にフラストレーションによる発散が見られる。そして、 $t'$ を $t$ から変化させて、フラストレーションを弱めていくと、このピークは崩れてゆくことがわかる。そして、 $t' = 0$ では、正方格子の1電子状態密度となる。Meilkeの強磁性は、このピークの位置にフェルミ面がくる時に強磁性基底状態が存在するというを示している。これは、以下のように考えることができる。(7)により、バンド毎の状態密度を、

$$\rho_\alpha(\epsilon) \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_\alpha(\mathbf{k})) \quad (\alpha = 1, 2) \quad (56)$$

とすると、この $\rho_\alpha(\epsilon)$ について、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_1(\epsilon) d\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_2(\epsilon) d\epsilon = \frac{N}{2} \quad (\because \text{各 } \mathbf{k} \text{ 点に 2 つのバンドの状態が 1 個ずつ存在する}) \quad (57)$$

が成立する。よって、 $\frac{1}{4}$ -filling 以下で $t' = t$ の時、クーロン相互作用 $U$ を入れた場合、 $U$ によるエネルギーを損しないようにするため、スピンの1方向にそろった強磁性基底状態が存在する。

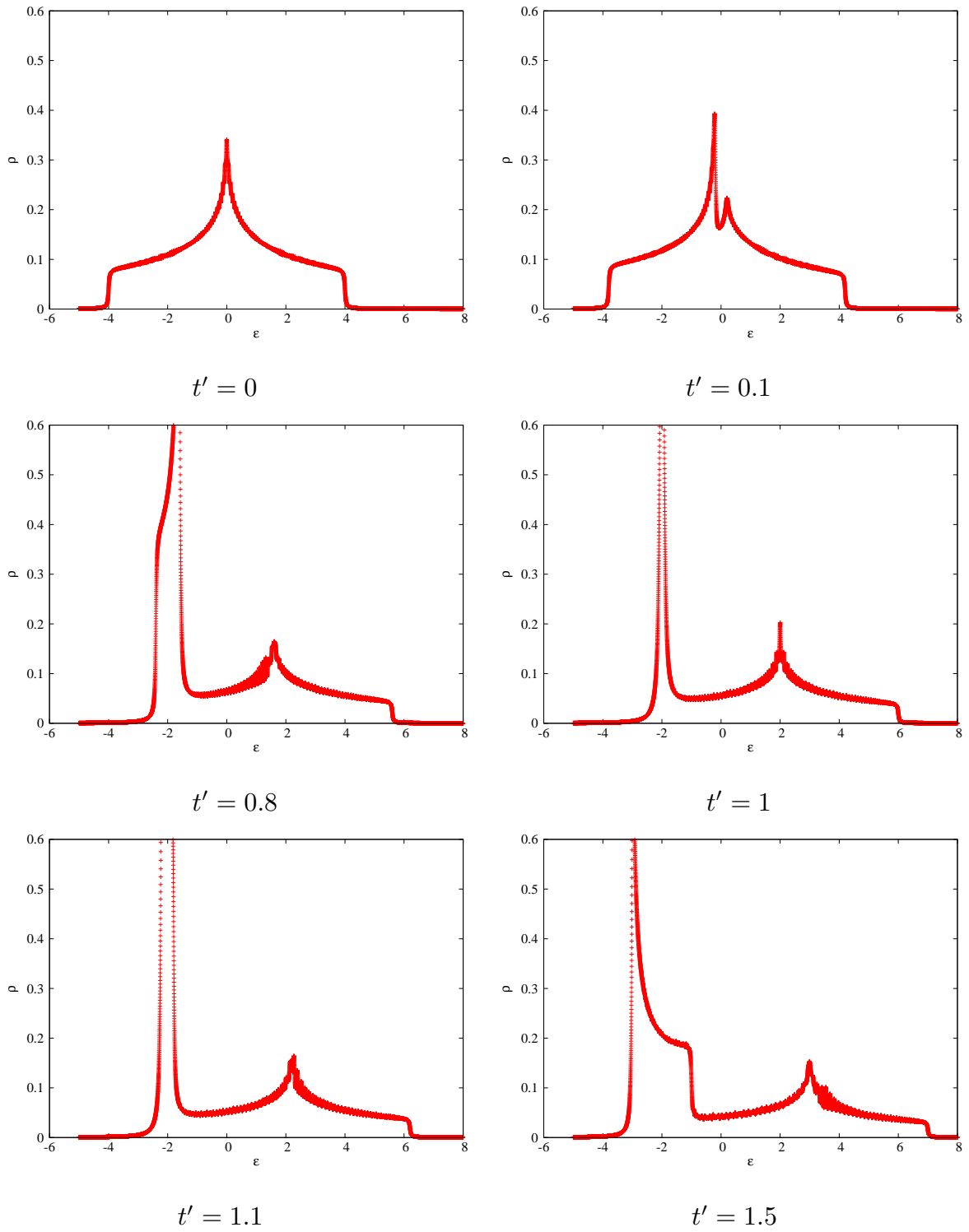
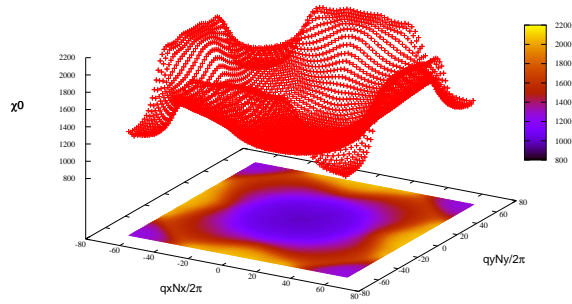
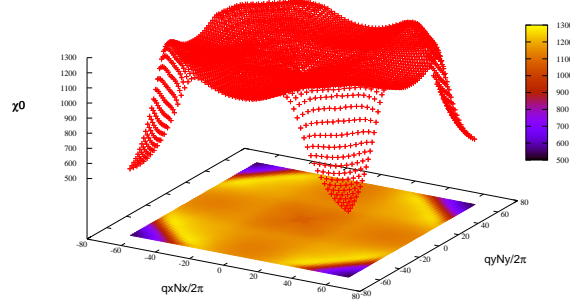


図8 2次元チェッカーボード格子の様々な  $t'$  に対する状態密度

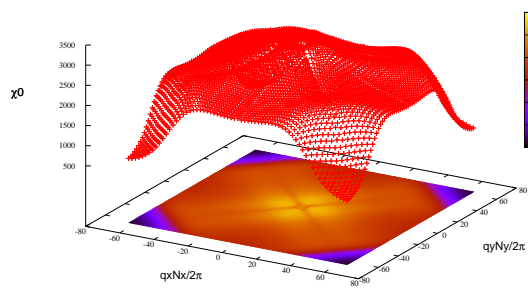
相互作用の無い場合の感受率  $\chi_0$  の計算結果を図 9, 図 10 に示す。この計算は、 $k$ -点の数を  $N_x \times N_y = 128 \times 128$  とし、 $t = 1$  に固定して行った。図 9 の  $\frac{1}{4}$ -filling では、 $t'$  を  $t$  に近づけた時に、 $q = (0, 0)$  の近傍での帯磁率が enhance される構造になっている。これは、Mielke の定理と関連していると考えられる。half-filling(図 10) では、 $t' = 0$  つまり、正方格子の時に、 $q = (\pi, \pi)$  の点にピークがある。これは、half-filling の正方格子は反強磁性の磁気秩序が存在することを示唆している。 $t' < t$  を満たしながら  $t'$  を大きくしていく場合、 $q = (\pi, \pi)$  のピークは抑えられる傾向にある。また、 $t' < t$  から  $t' > t$  で構造が大きく変化しており、 $t' > t$  に関しては、 $t'$  が  $t$  に近い時は、 $q = (0, 0)$  の近傍での帯磁率が enhance されており、 $t'$  が大きくなるにつれ、 $q = (\pi, 0), (-\pi, 0), (0, \pi), (0, -\pi)$  での値が enhance されてくるような構造となっている。



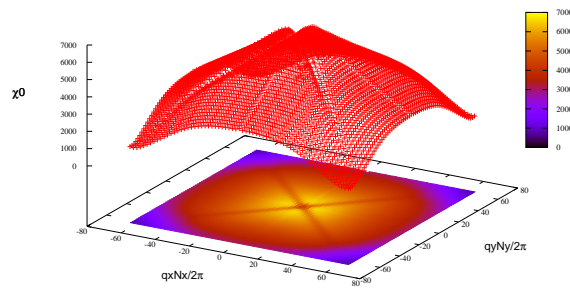
$t' = 0$



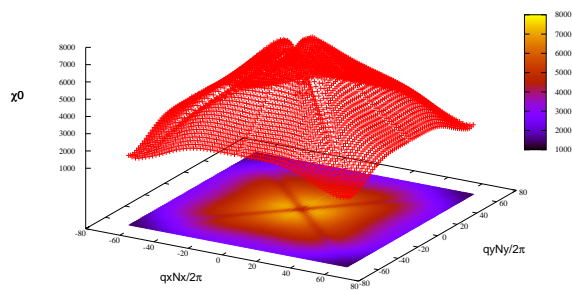
$t' = 0.1$



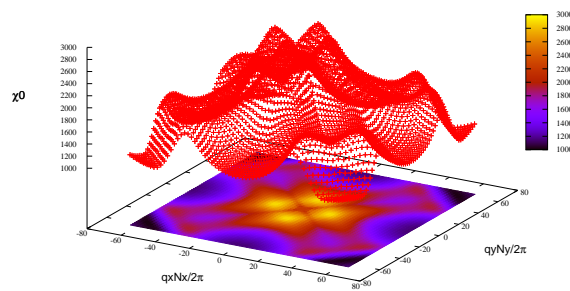
$t' = 0.7$



$t' = 0.9$



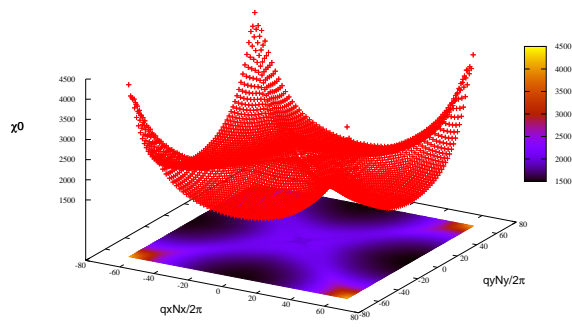
$t' = 1.1$



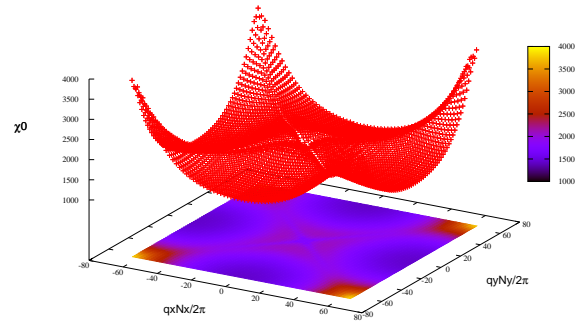
$t' = 1.5$

図9  $\frac{1}{4}$ -filling での  $t'$  を変化させた時の  $\chi_0(q)$  のグラフ

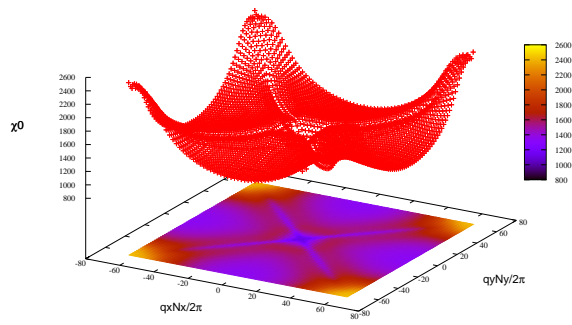




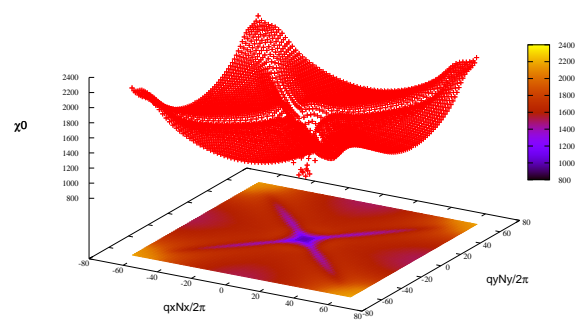
$t' = 0$



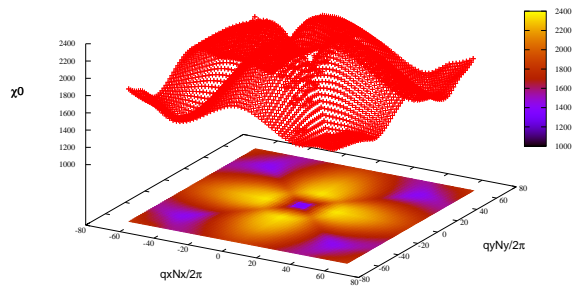
$t' = 0.1$



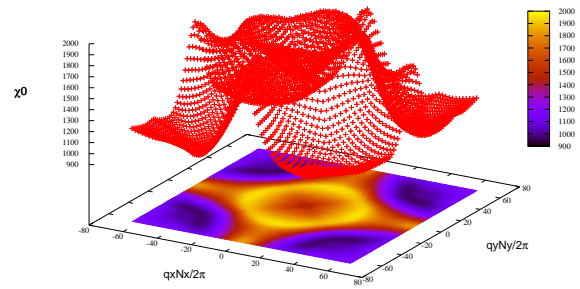
$t' = 0.7$



$t' = 0.9$



$t' = 1.1$



$t' = 1.5$

図 10 half-filling での  $t'$  を変化した時の  $\chi_0(q)$  のグラフ

## 4.2 8 サイト系に対する数値対角化の結果

8 サイト系における数値対角化の結果に関して、基底状態の電子数ごとの  $t' - U$  の相図を以下に示す。

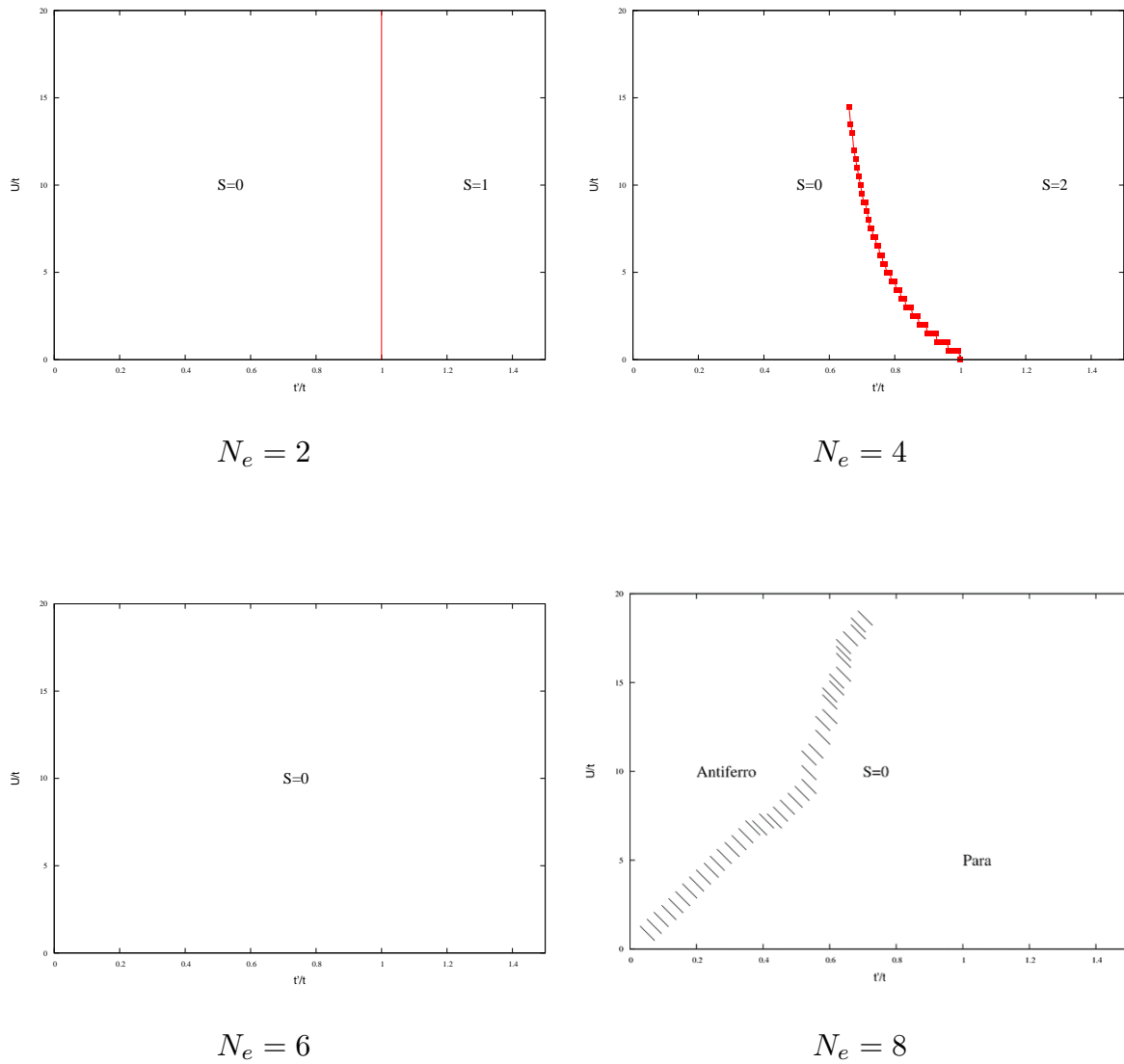


図 11  $N = 8$  での  $t' - U$  の相図

### 4.3 16 サイト系に対する数値対角化の結果

16 サイト系における数値対角化の結果に関して、基底状態の電子数ごとの  $t' - U$  の相図を以下に示す。

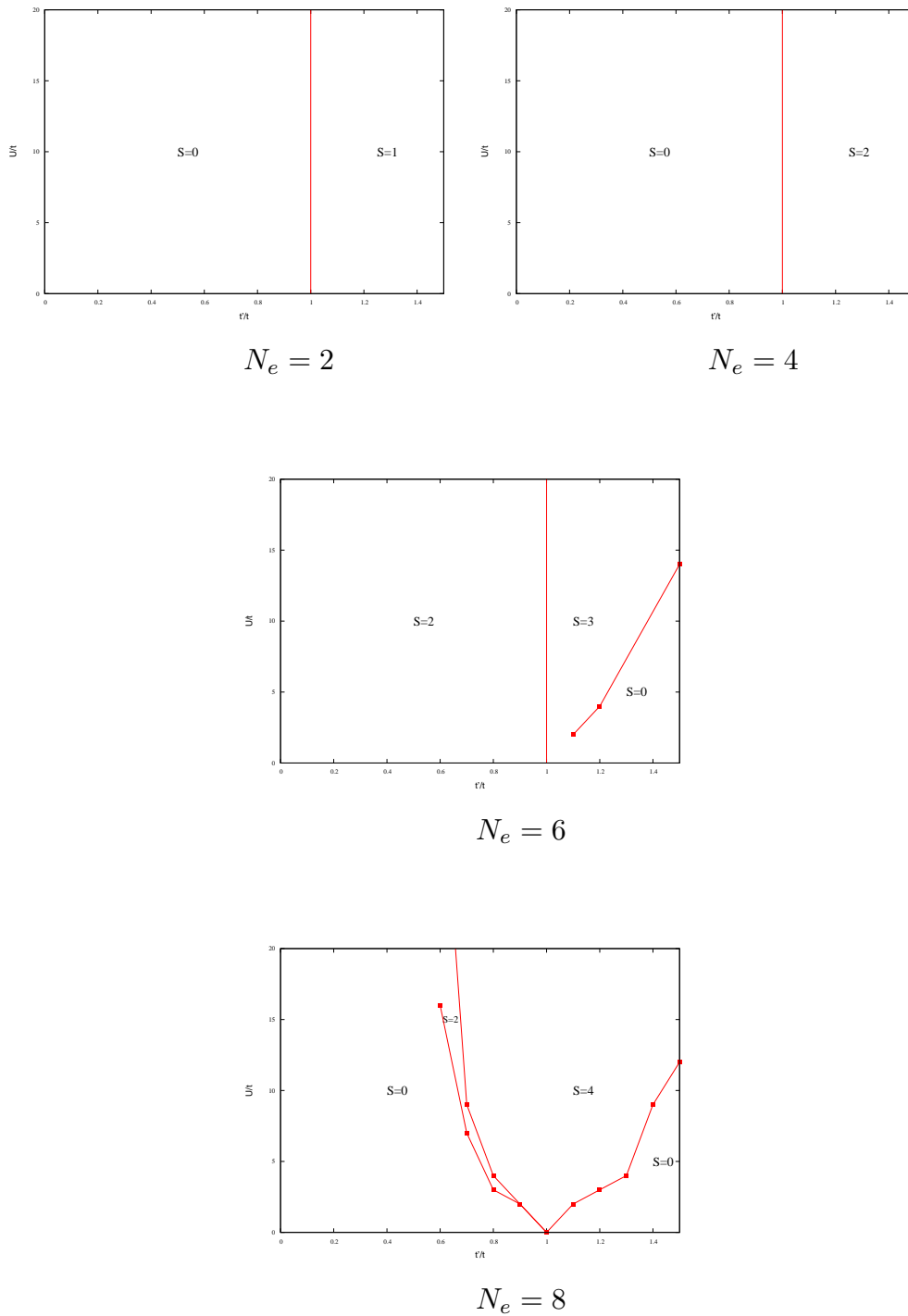
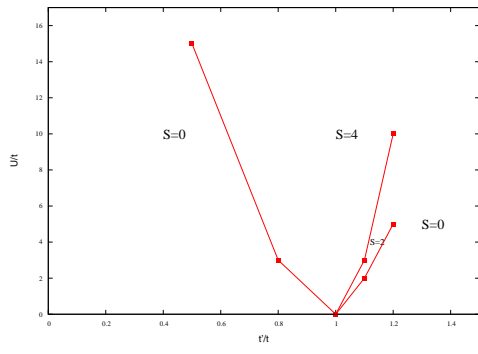
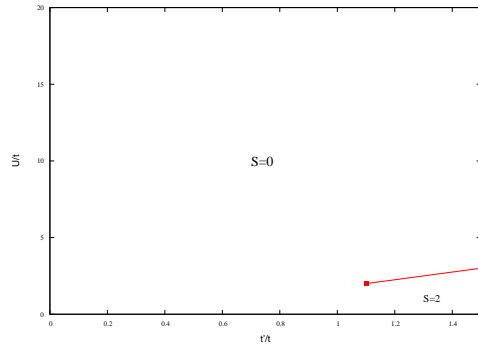


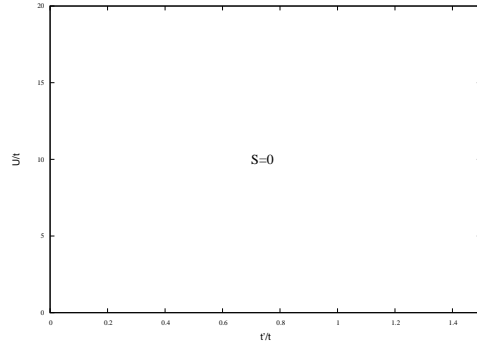
図 12  $N = 16, N_e = 2, 4, 6, 8$  での  $t' - U$  の相図



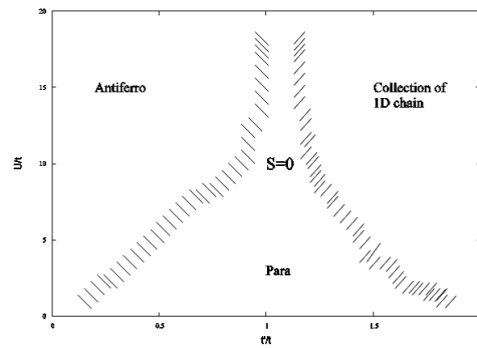
$N_e = 10$



$N_e = 12$



$N_e = 14$



$N_e = 16$

図 13  $N = 16, N_e = 10, 12, 14, 16$  での  $t' - U$  の相図

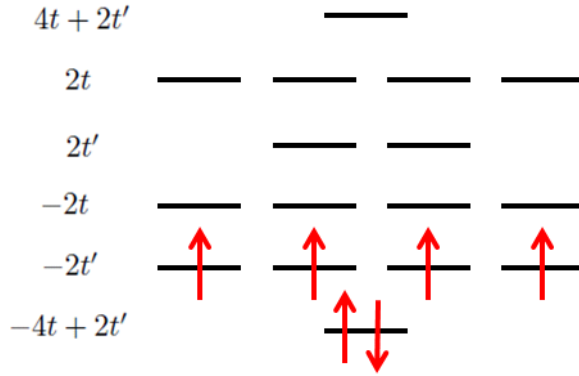


図 14  $N = 16$ ,  $N_e = 6$ ,  $0 < t' < t$  のエネルギーレベルに対して、 $U \neq 0$  におけるエネルギーが最も低いと考えられる電子配置

この相図に関しては、 $U = 0$  の線上は除いて基底状態のスピン値  $S$  を表記してある。ここで、 $S = S_{max}$  の状態と他の  $S$  の状態が縮退している相の場合は、強磁性基底状態が存在することを表すため  $S = S_{max}$  と表記してある。quarter-filling、half-filling に関しては、スピン相関関数の結果と併せて後ほど別に議論する。ここではその他の結果に関して、有限サイズの範囲で filling 毎に相図の特徴をみる。

$N = 8$  での  $N_e = 2$ 、 $N = 16$  での  $N_e = 2, 4$  に関しては、 $t' = t$  に相の境界があり、 $t' < t$  では  $U$  の値に依らず常磁性、そして  $t' > t$  では強磁性基底状態が存在するという結果が得られた。また、この相の境界も  $U$  に依存しないものとなっている。数値計算の結果は、 $totalS^z = 0$  の部分空間における最低エネルギー  $E(S^z = 0)$  と  $totalS^z = S_{max}$  の部分空間における最低エネルギー  $E(S^z = S_{max})$  が  $t' = t$  で  $U$  に依存せず level crossing をすることになっている。

$N = 16$  での  $N_e = 6$  に関しては、 $U \neq 0$  においては、 $t' < t$  の領域では  $S = 2$  となり、 $t' > t$  ではある  $U$  を超えると  $S = S_{max} = 3$  の基底状態が存在する。この  $S = 2$  の相に関して、1 電子のエネルギーレベルを利用して考察する。 $t' < t$  での 1 電子エネルギーレベルに、6 つの電子をエネルギーが最低になるように詰め、その状態に  $U$  が加わった状況を考える (図 14)。電子は 1 番下のエネルギーレベルに 2 重占有し、2 番目に低いエネルギーレベル (4 重縮退) には  $U$  によるエネルギーの上昇を防ぐため、4 つの電子がスピンをそろえて配置され、 $S = 2$  の相が安定であると推測される。ここで、1 番低いエネルギーレベルの 2 重占有は  $U$  を大きくしても残ったままであるが、これは、1 電子のエネルギーレベルの考察に加えて、基底状態の波動関数の性質を詳しく議論する必要があることが予測されるため、複雑な問題である。今回は波動関数の議論の詳細には立ち入らない。

$N = 16$  での  $N_e = 10$  については、 $t' < t$  においては、 $t'$  が  $t$  に近いところで、 $U$  を大きくしていくと、 $S = 0$  から  $S = 4$  の不完全強磁性の状態に転移する。このことに関して、 $N = 16$ ,  $N_e = 6$  の時と同様の考察をする。 $U = 0$  のとき、電子配置は図 15 のように閉殻となり  $S = 0$  が安定である。ここに  $U$  を加えていくと、ある大きさ  $U'$  になった時、下から 2 番目 (4 重縮退) と 3 番目 (4 重縮退) のエネルギーレベル間で、低いエネルギーレベル内で 2 重占有をするよりも高いエネルギーレベルに移りスピンを揃え、 $U$  によるエネルギーの上昇を防ぐ

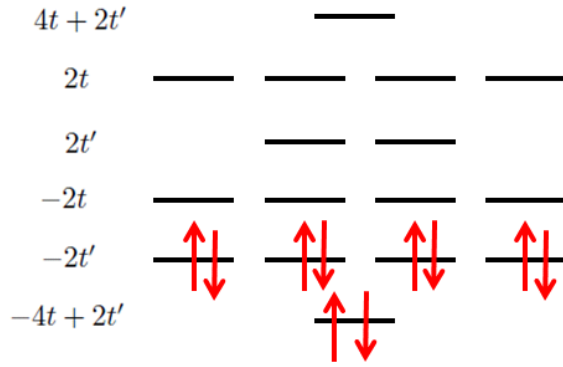


図 15  $N = 16$ ,  $N_e = 10$ ,  $0 < t' < t$  のエネルギーレベルに対して、 $U = 0$  におけるエネルギーが最も低いと考えられる  $S = 0$  の相での電子配置

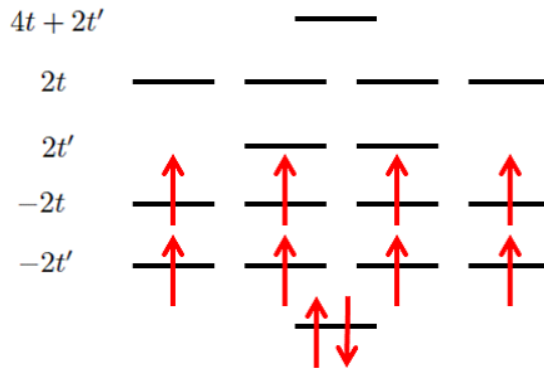


図 16  $N = 16$ ,  $N_e = 10$ ,  $0 < t' < t$  のエネルギーレベルに対して、ある程度大きな  $U \neq 0$  におけるエネルギーが最も低いと考えられる  $S = 4$  の相での典型的な電子配置

ことで、より低エネルギーの状態になると考えられる (図 16)。ここで、1 番低いエネルギーレベルの 2 重占有に関しては、 $N_e = 6$  と同様に基底状態の波動関数の性質についての考察が必要である。また、 $t' > t$  の領域では、 $t'$  が  $t$  に近いところで  $U$  を大きくしていくと、 $S = 0$  から  $S = 2$  を経て  $S = 4$  の不完全強磁性という結果が得られた。この結果については、 $t' > t$  では 1 電子のエネルギーレベルの構造が  $t' < t$  の場合と異なるため、 $t' < t$  とは異なった電子配置によって基底状態が構成されているが、この領域に関しても 1 電子レベルによる考察のみでは説明することが難しく、波動関数の性質を詳しく知る必要があると考えられる。

$N = 8$  での  $N_e = 6$ 、 $N = 16$  での  $N_e = 12$  については、相図の大部分が  $S = 0$  ( $N = 16$  においては  $t' > t$  の  $U$  が小さい領域は  $S = 2$  となっている) である。

そして、 $N = 16$  での  $N_e = 14$  に関しては、今回の計算の全領域で  $S = 0$  となるという結果が得られた。

更に、 $N = 16$  における各電子数ごとの、代表的な  $t', U$  におけるスピン相関関数の計算結果を以下に示す。なおこのグラフの横軸は、全格子点を等価とした時の  $k$ -点 (図 17) を、原点からの距離が近い順に左から並べており、縦軸はその  $k$ -点におけるスピン相関関数 (55) の数値計算の値をプロットしている。

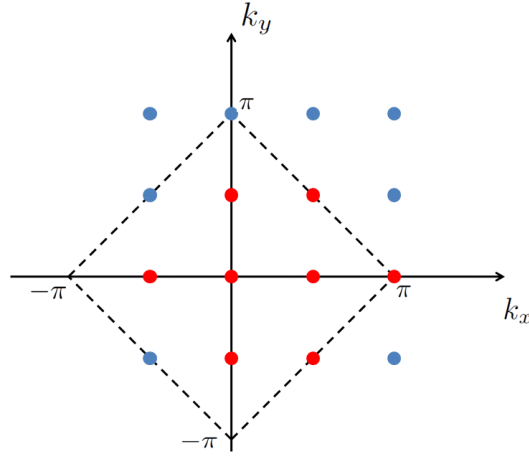


図 17  $N = 16$  のチェッカーボード格子における本計算での  $k$ -点。点線は reduced zone の境界、赤の点は reduced zone 内の  $k$ -点、青の点は reduced zone 外の  $k$ -点を表す

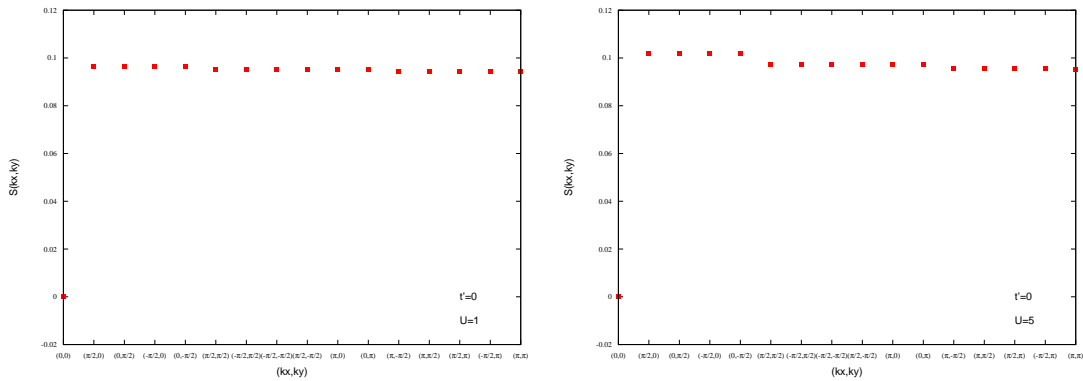


図 18  $N_e = 2, t' = 0$  のスピン相関関数

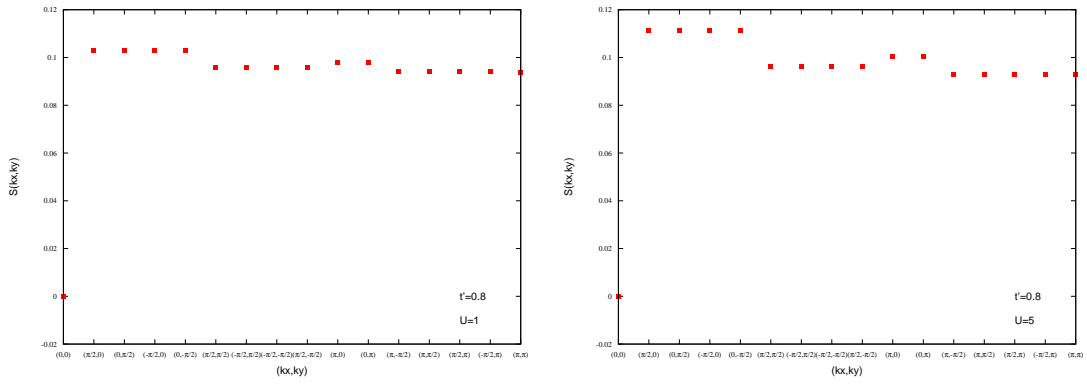


図 19  $N_e = 2, t' = 0.8$  のスピン相関関数

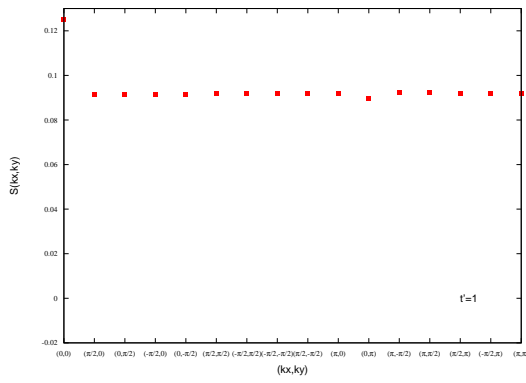


図 20  $N_e = 2, t' = 1, U \neq 0$  のスピン相関関数

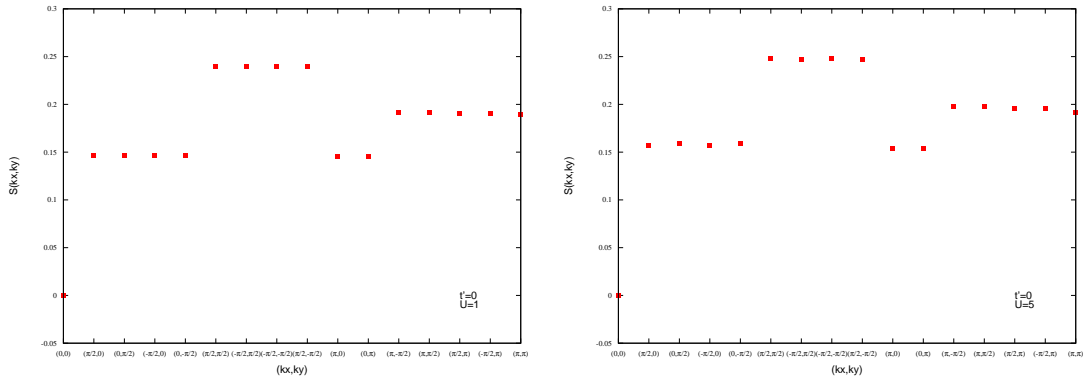


図 21  $N_e = 4, t' = 0$  のスピン相関関数



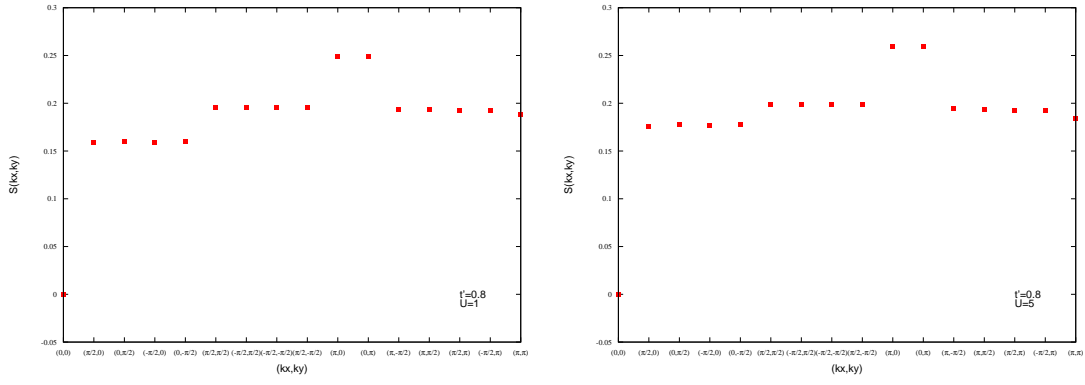


図 22  $N_e = 4, t' = 0.8$  のスピン相関関数

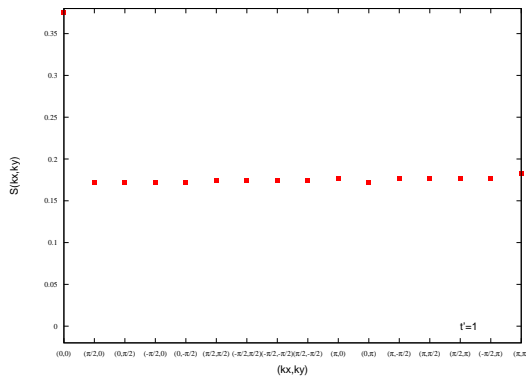


図 23  $N_e = 4, t' = 1, U \neq 0$  のスピン相関関数

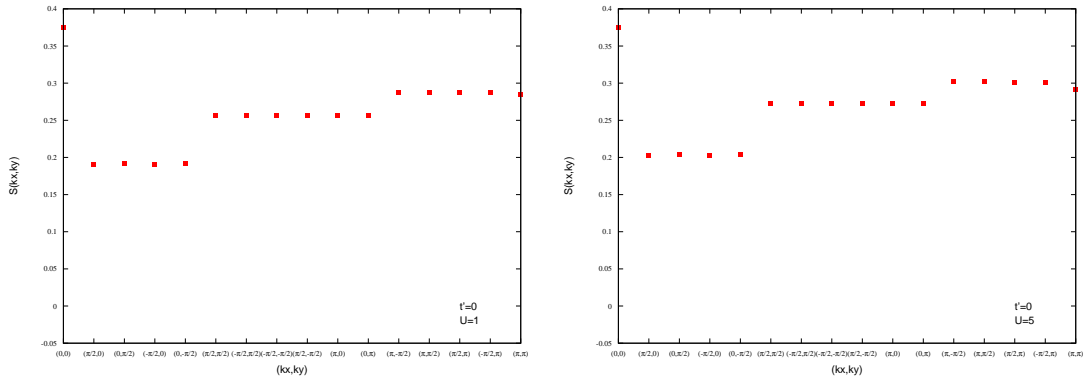


図 24  $N_e = 6, t' = 0$  のスピン相関関数

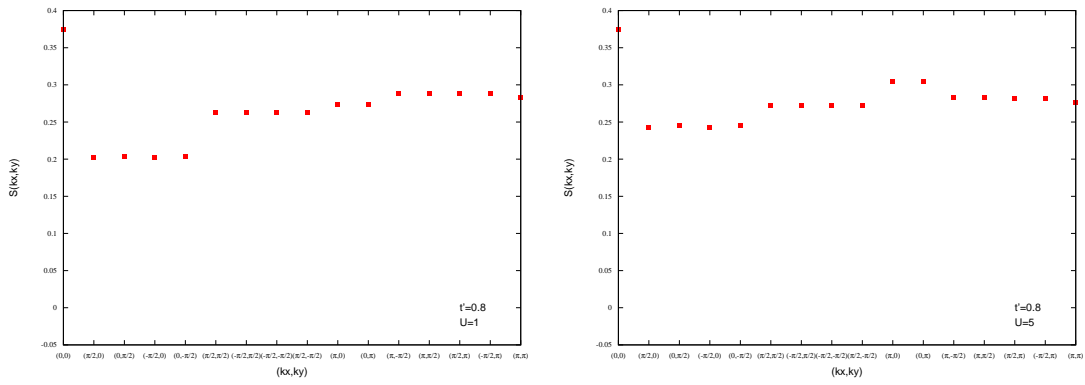


図 25  $N_e = 6, t' = 0.8$  のスピン相関関数

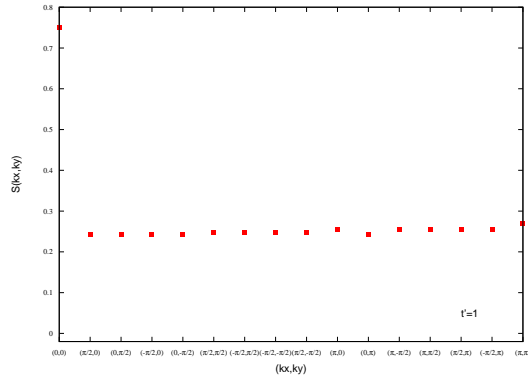


図 26  $N_e = 6, t' = 1, U \neq 0$  のスピン相関関数

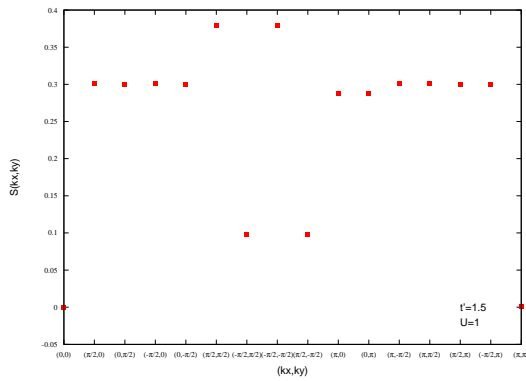


図 27  $N_e = 6, t' = 1.5$  のスピン相関関数

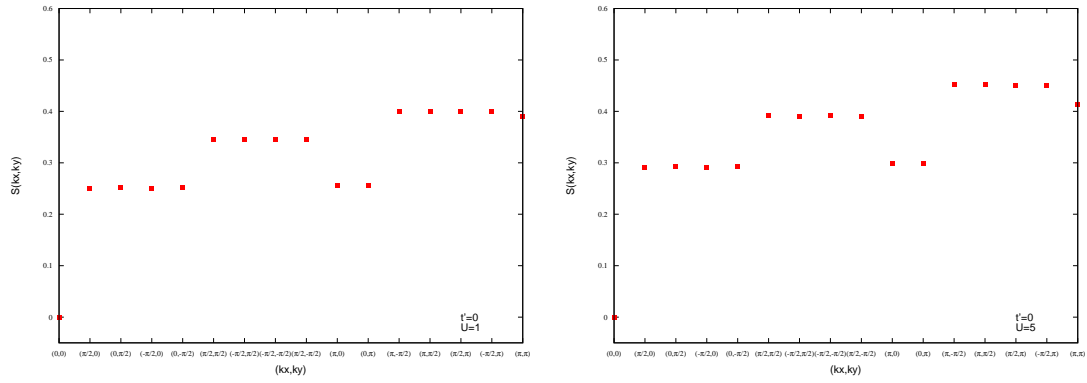


図 28  $N_e = 8, t' = 0$  のスピン相関関数

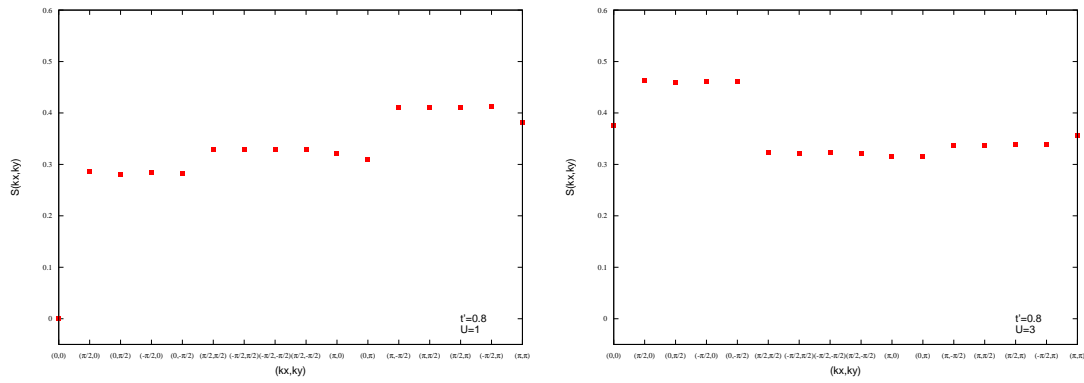


図 29  $N_e = 8, t' = 0.8$  のスピン相関関数

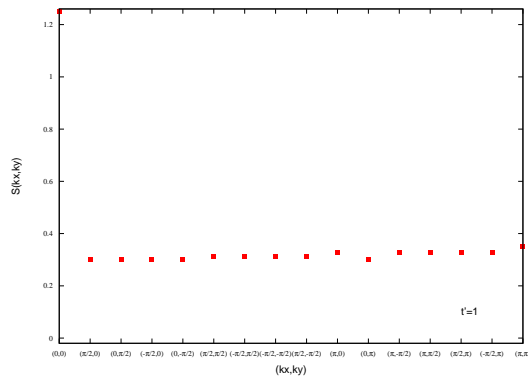


図 30  $N_e = 8, t' = 1.0, U \neq 0$  のスピン相関関数

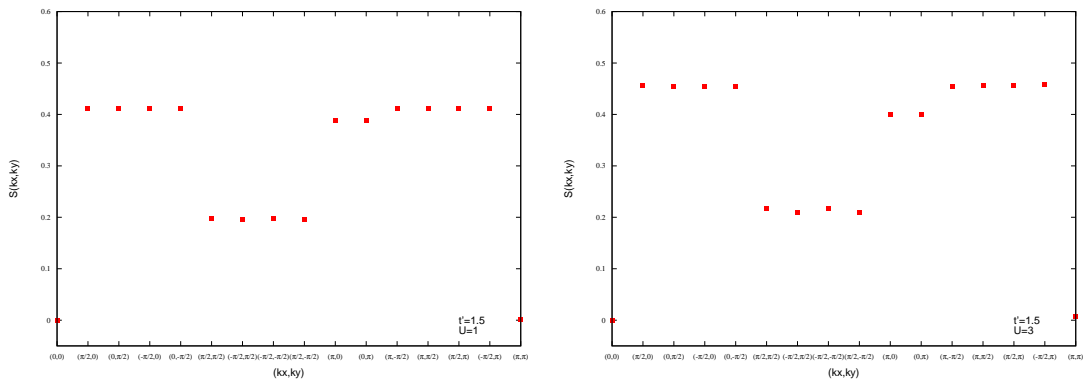


図 31  $N_e = 8, t' = 1.5$  のスピン相関関数

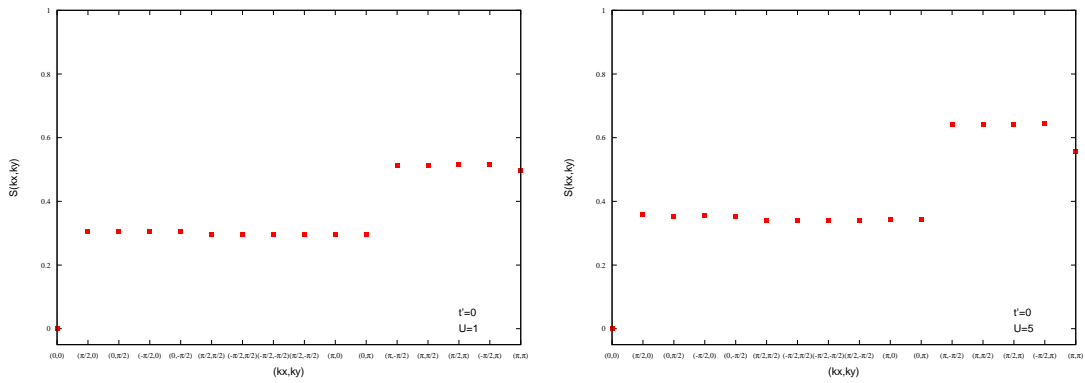


図 32  $N_e = 10, t' = 0$  のスピン相関関数

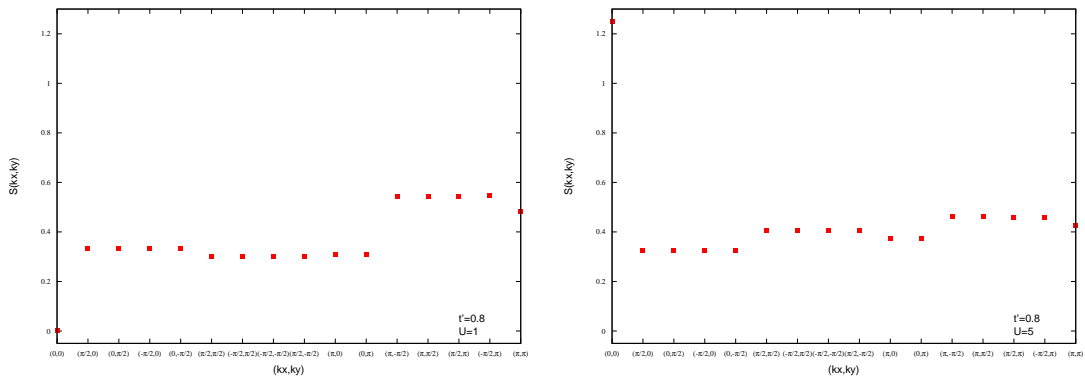


図 33  $N_e = 10, t' = 0.8$  のスピン相関関数

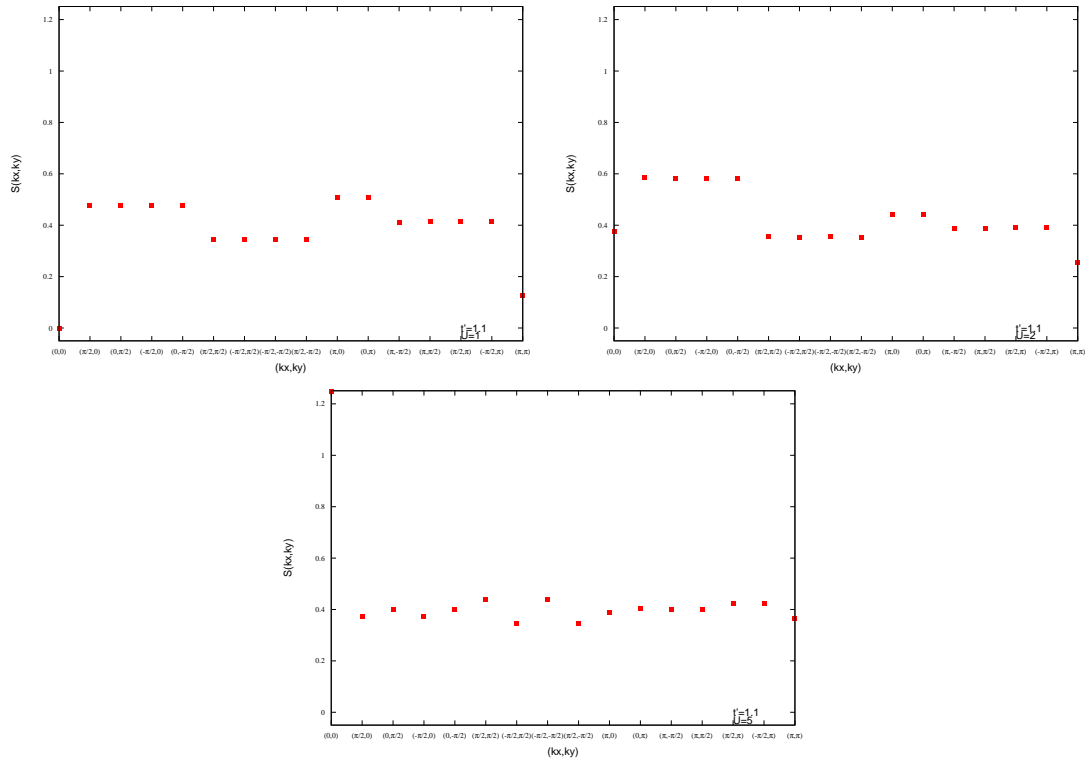


図 34  $N_e = 10, t' = 1.1$  のスピン相関関数

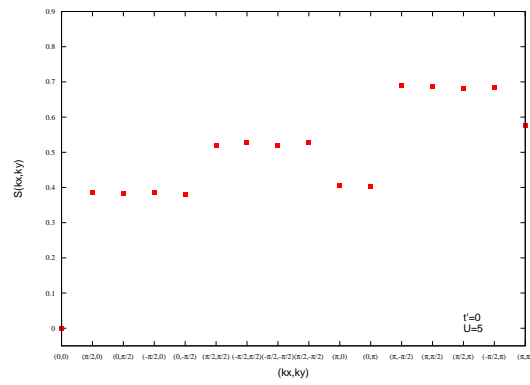


図 35  $N_e = 12, t' = 0$  のスピン相関関数

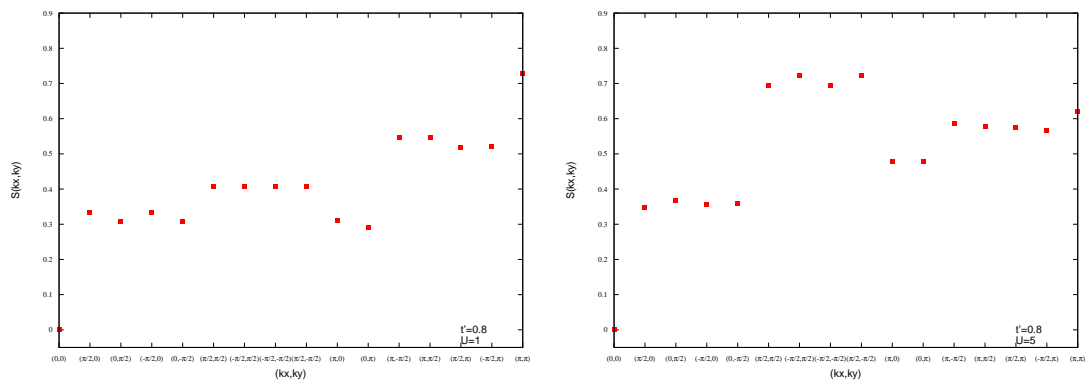


図 36  $N_e = 12, t' = 0.8$  のスピン相関関数

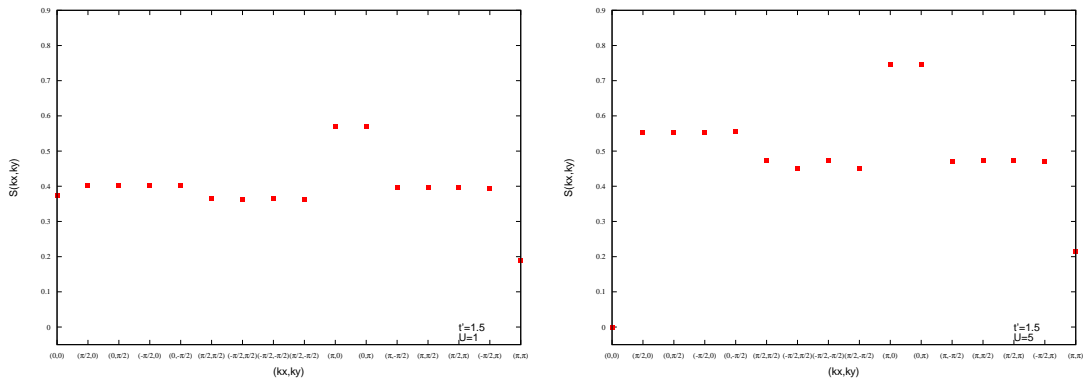


図 37  $N_e = 12, t' = 1.5$  のスピン相関関数

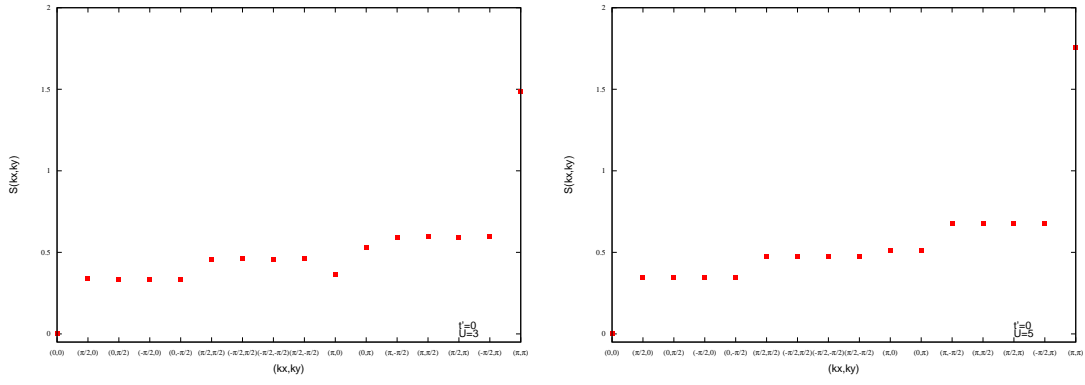


図 38  $N_e = 14, t' = 0$  のスピンの相関関数

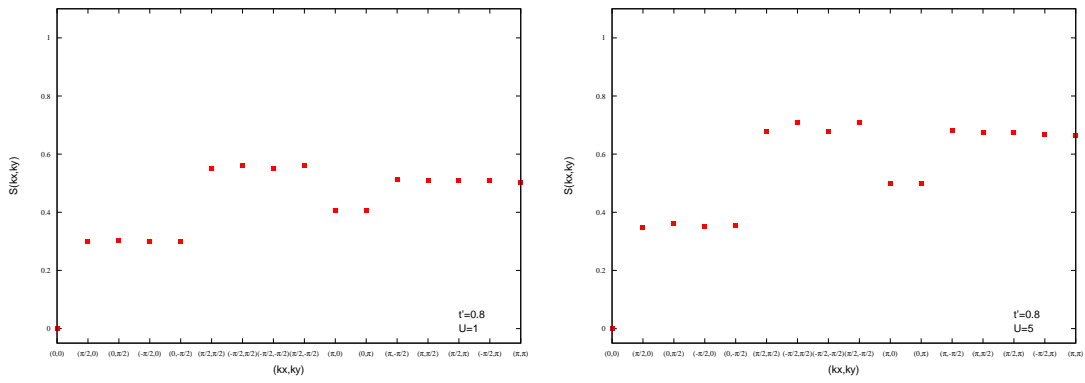


図 39  $N_e = 14, t' = 0.8$  のスピンの相関関数

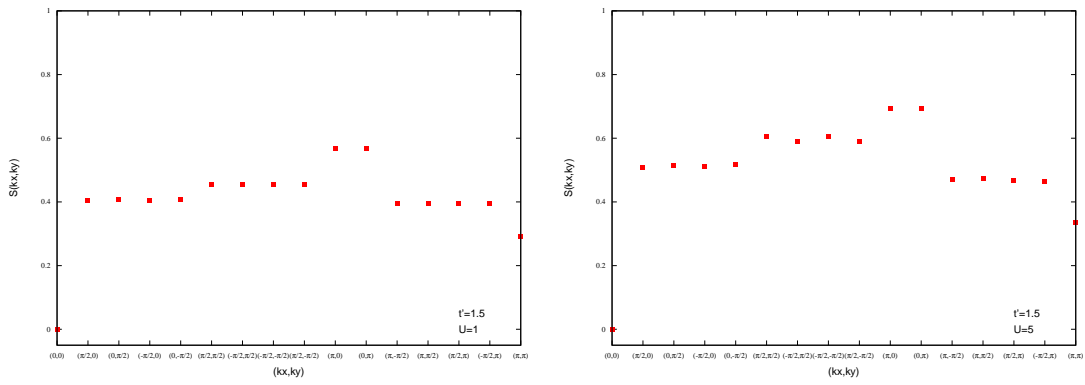


図 40  $N_e = 14, t' = 1.5$  のスピンの相関関数

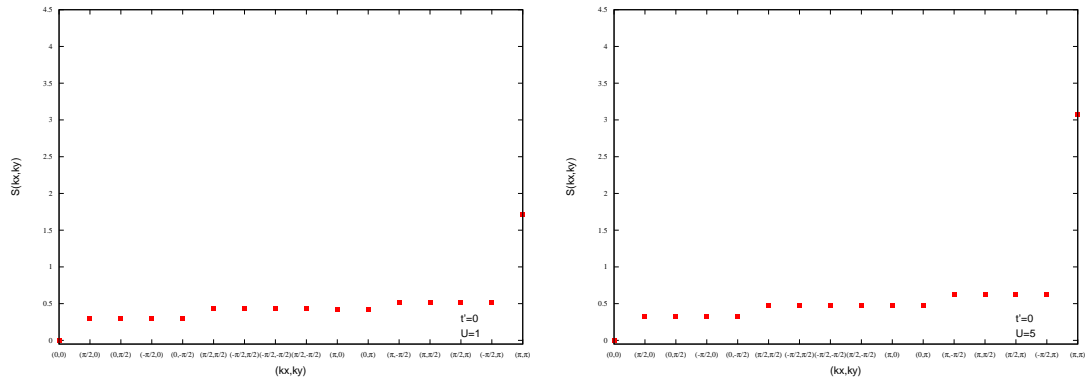


図 41  $N_e = 16, t' = 0$  のスピンの相関関数

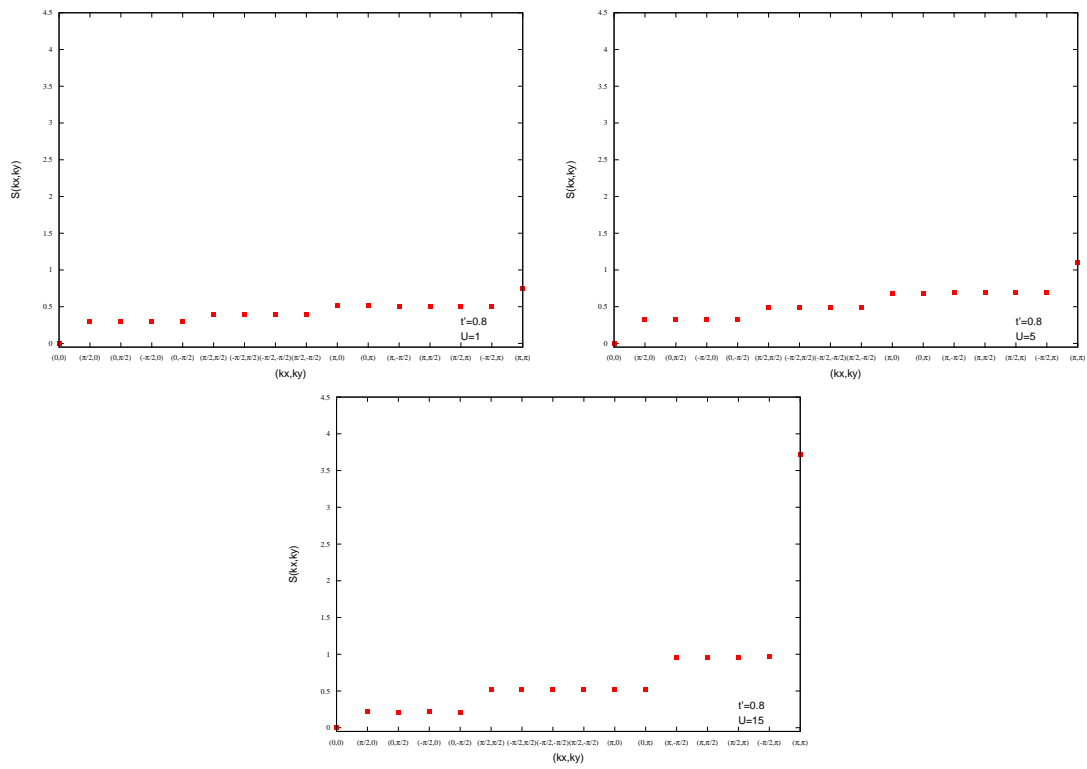


図 42  $N_e = 16, t' = 0.8$  のスピンの相関関数



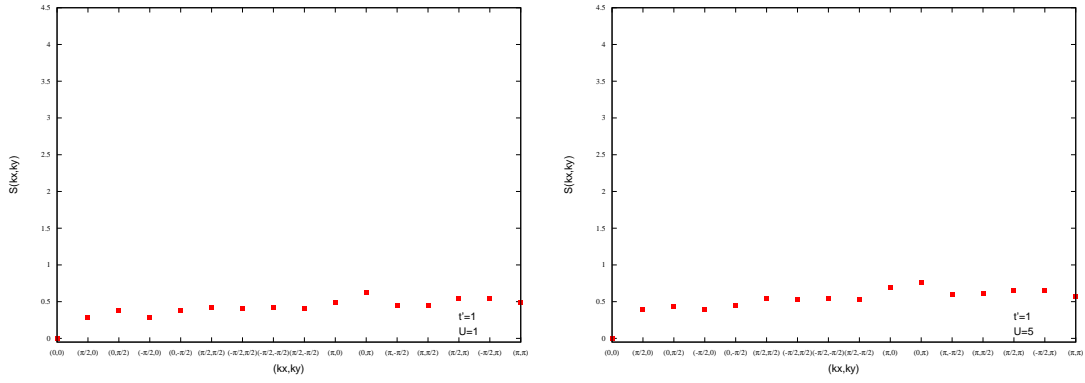


図 43  $N_e = 16, t' = 1$  のスピン相関関数

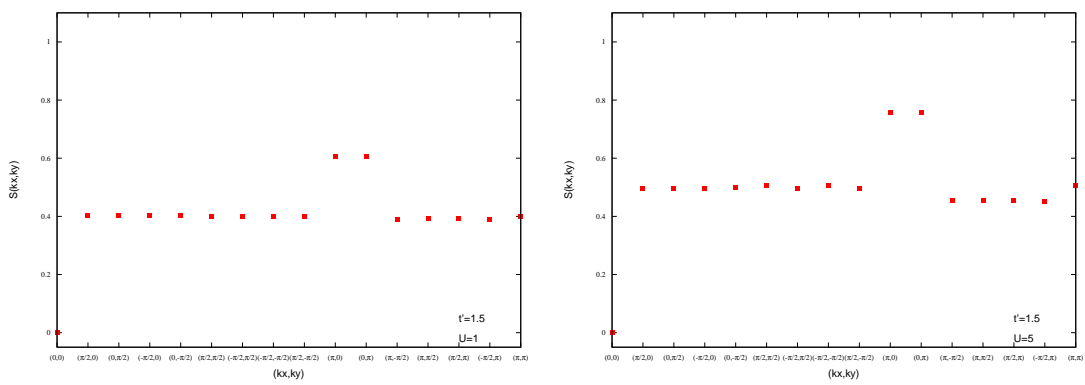


図 44  $N_e = 16, t' = 1.5$  のスピン相関関数

ここで、 $N_e = 2, 4, 6, 8$  における強磁性相 ( $S = S_{max}$  の相) について考察する。今回の数値計算において、図 20、図 23、図 26、図 30 は、Mielke の強磁性状態についてのスピン相関関数を表している。 $S(q = 0)$  に関しては、

$$\begin{aligned} S(q = 0) &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \\ &= \frac{S(S+1)}{N} \end{aligned} \quad (58)$$

であり、数値計算の結果と整合的である。

次に、 $q \neq 0$  について考える。図をみると  $S(q \neq 0)$  の数値計算の結果は、有限の  $q$  で  $q$ -依存性が小さくなっている。このことに関して、以下のように考える。 $S(q)$  の定義より、

$$\begin{aligned} S(q) &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle e^{iq \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \\ &= \sum_i \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_0 \rangle e^{iq \cdot \mathbf{R}_i} \\ &= \sum_{i \neq 0} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_0 \rangle e^{iq \cdot \mathbf{R}_i} + \langle \mathbf{S}_0^2 \rangle \end{aligned} \quad (59)$$

となる。ここで、 $S(q \neq 0)$  の  $q$  依存性が小さいと仮定し、異なるサイト間の相関関数が座標によらない

$$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \simeq \langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \quad (60)$$

と仮定すると、

$$S(q) \simeq N \langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \delta_{q,0} + \langle \mathbf{S}_0^2 \rangle - \langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \quad (61)$$

となる。第 2 項、第 3 項は有限の  $q$  に対する部分である。また、全スピンの定義と、仮定 (60) より、

$$\begin{aligned} S(S+1) &= \langle (\sum_i \mathbf{S}_i) \cdot (\sum_j \mathbf{S}_j) \rangle \\ &\simeq N \langle \mathbf{S}_0^2 \rangle + N(N-1) \langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \end{aligned} \quad (62)$$

今、完全強磁性の基底状態を考えているので、 $N \langle \mathbf{S}_0^2 \rangle = N_e \frac{1}{2} (\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4} N_e$  となるので、これを用いると、

$$\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_0 \rangle = \frac{S(S+1) - \frac{3}{4} N_e}{N(N-1)} \quad (63)$$

が成立する。(63) を (61) に代入すると、今回の仮定の下での  $S(q \neq 0)$  の部分の平均値が求まり、それを  $S^{av}(q \neq 0)$  と書くと、

$$\begin{aligned} S^{av}(q \neq 0) &\equiv \langle \mathbf{S}_0^2 \rangle - \langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \\ &= \frac{\frac{3}{4} N_e}{N-1} - \frac{S(S+1)}{N(N-1)} \end{aligned} \quad (64)$$

となる。

一方、 $S(\mathbf{q})$  の定義に対して、両辺  $\mathbf{q}$  で和をとると、

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{q}} S(\mathbf{q}) &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \\
\Rightarrow \frac{S(S+1)}{N} + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} S(\mathbf{q}) &= \sum_i \langle \mathbf{S}_i^2 \rangle \\
\Rightarrow \frac{S(S+1)}{N} + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} S(\mathbf{q}) &= \frac{3}{4} N_e \\
\Rightarrow \sum_{\mathbf{q} \neq 0} S(\mathbf{q}) &= \frac{3}{4} N_e - \frac{S(S+1)}{N}
\end{aligned} \tag{65}$$

となる。この両辺を  $(N-1)$  で割ると、左辺は  $S(\mathbf{q} \neq 0)$  の平均値となり、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} S(\mathbf{q}) &= \frac{\frac{3}{4} N_e - \frac{S(S+1)}{N}}{N-1} \\
&= \frac{\frac{3}{4} N_e}{N-1} - \frac{S(S+1)}{N(N-1)}
\end{aligned} \tag{66}$$

となり、 $S^{av}(\mathbf{q} \neq 0)$  と一致する。

更に、今回の数値計算における相関関数の計算値を  $S^{calc}(\mathbf{q})$  とすると、 $N_e = 2, 4, 6, 8$  において数値計算の結果は

$$\frac{1}{N-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} S^{calc}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} S(\mathbf{q}) = S^{av}(\mathbf{q} \neq 0) \tag{67}$$

を満足している。Mielke の強磁性状態については、 $S(\mathbf{q} \neq 0)$  は平均値のまわりで、 $\mathbf{q}$ -依存性が小さく散乱しているという事実は、強磁性状態でのスピン相関は座標に余り依存しないことを意味している。

## 5 quarter-filling、half-filling の基底状態

ここでは、本研究の主要な結果である  $N = 8, 16$  における quarter-filling、half-filling に関する結果について、有限サイズ効果を越えて成り立つと考えられる基底状態の性質に関して議論する。

### 5.1 quarter-filling について

$N = 8$  での  $N_e = 4, N = 16$  の  $N_e = 8$  の基底状態に関して、この filling では、格子の構造上波動関数は重なりを持っているため、金属的であると推測される。そして相図について、 $t' < t$  で  $t'$  が  $t$  に近い時、ある  $U_C$  が存在し、 $U = U_C$  で、常磁性から Mielke のフラットバンド強磁性へと転移する<sup>\*3</sup>。そして  $U$  を増大させていった時、強磁性相が広がっていく。これは、クーロン相互作用によるエネルギーの上昇を避けるように振る舞うためであると考えられ、Kusakabe, Aoki[14] による計算の結果と整合的になっているが、転移点近傍での詳細については、波動関数に関しても詳しく議論する必要があると考えられる。次に  $t' > t$  の領域に関して、 $N = 8$  での計算では  $S = S_{max}$  の領域のみであるのに対して、 $N = 16$  に関しては、常磁性相が存在する。これについて、 $N = 8$  で  $t' > t$  に関するエネルギーレベルにおいて、有限の  $U$  が存在するとき 4 つの電子をエネルギーを低くするように詰めた時の典型的な電子配置を図 45 に示す。このエネルギーレベルは、最も低いレベルが 4 重に縮退しており、そこにちょうど 4 つの電子が詰まることになるので、 $S = S_{max} = 2$  の強磁性が常に基底状態ということになるが、これは有限サイズの効果であり、bulk での性質は  $S = 0$  と  $S = S_{max}$  の相が存在する  $N = 16$  の結果が本質をとらえていると考えられる。この  $S = 0$  の相の基底状態について考える。 $t' \gg t$  の時は、格子はホッピング  $t'$  の 1 次元の chain が  $t$  で結合しているとみなすことができる。この場合に quarter-filling の電子をエネルギーが最低になるような電子配置は 4 重に縮退している。 $t'$  による運動エネルギーを得をするために、chain 毎に quarter-filling となり、1 つの chain を取り出すと、1 サイトおきに電子が配置される。そして近い電子同士は逆向きのスピン配置となる。更に  $t$  のボンド間でもなるべくスピンの反平行になるような配置を考えると、図 46 に示すような charge stripe 型または plaquette 型の電子配置が安定であると期待される。今回のスピン相関関数の計算結果 (図 31) は  $S(\frac{\pi}{2}, \pi) [S(\frac{\pi}{2}, 0)]$  に対応する値が相対的に enhance されており、charge stripe 型または plaquette 型の電子配置の描像と整合する結果となっている。

### 5.2 half-filling について

$N = 8$  での  $N_e = 8, N = 16$  での  $N_e = 16$  の相図について、 $t' < t$  の領域については、 $U$  を大きく時に反強磁性が強く現れる。(図 42)。この領域では、Yoshioka, Koga, Kawakami の

<sup>\*3</sup>  $N = 16$  に関しては、 $S = 2$  を経て完全強磁性へ転移するが、これは有限サイズ効果の可能性がある

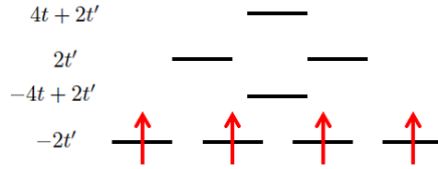


図 45  $N = 8, N_e = 4$  で  $t' > t$  のエネルギーレベルに対して  $U \neq 0$  の時、エネルギーが最も低い典型的な電子配置

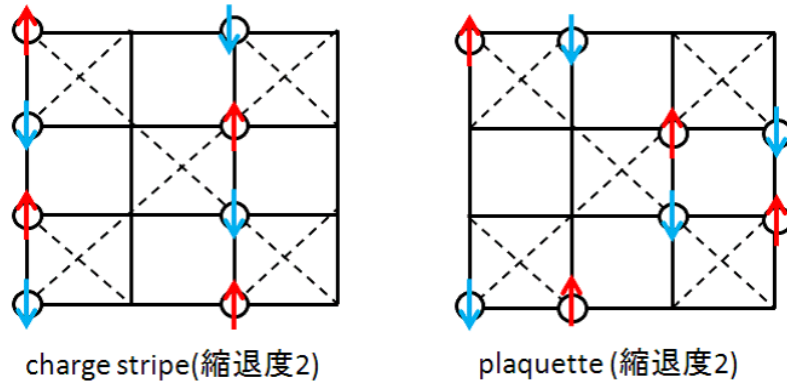


図 46 quarter-filling で  $t' > t, U \neq 0$  の時の  $S = 0$  の相における基底状態のスピンの構造の模式図

研究の結果 [18] の計算によると、ある小さな  $t$  においては  $U$  を大きくしていくと常磁性金属相から反強磁性絶縁体相への転移が起こり、 $t' \simeq 0.8t$  では、 $U$  を大きくしていくと常磁性金属から plaquette singlet 絶縁体へ転移し、更に反強磁性絶縁体へ転移するという結果が得られている。しかし、本研究での厳密対角化による解析では、この相転移を明確に求めることが困難である。次に、 $t' > t$  の領域で、 $U$  がある程度大きい場合について、quarter-filling のときと同様に  $t' \gg t$  の極限から考える。このとき、基底状態は  $t$  による幾何学的フラストレーションのため  $2^{(\text{calin 数}-1)}$  重に縮退している (今回は  $2^3 = 8$  である)。このスピン配置については、次のように考える。 $t'$  でつながる 1 次元 chain 内は half-filling で反強磁性的なスピン配置がエネルギーを低くする。そして、chain 間のボンド  $t$  を加味して、最も電子のエネルギーを得るようにスピン配置を決めると、基底状態は図 47 に示す 3 種類のスピン構造となることが予測される。今回計算した  $N = 16$  におけるスピン相関関数は、 $S(\pi, 0) [S(0, \pi)]$  にピークをもつ構造となっており、の spin stripe 型スピン配置の状態を示唆するものとなっている ( $N = 8$  でのスピン相関関数も  $S(\pi, 0) [S(0, \pi)]$  が enhance されているが、有限サイズ効果のため、他の  $k$ -点の相関関数との区別を明確につけることができなかったため、相図には spin stripe 相は明記しなかった)。

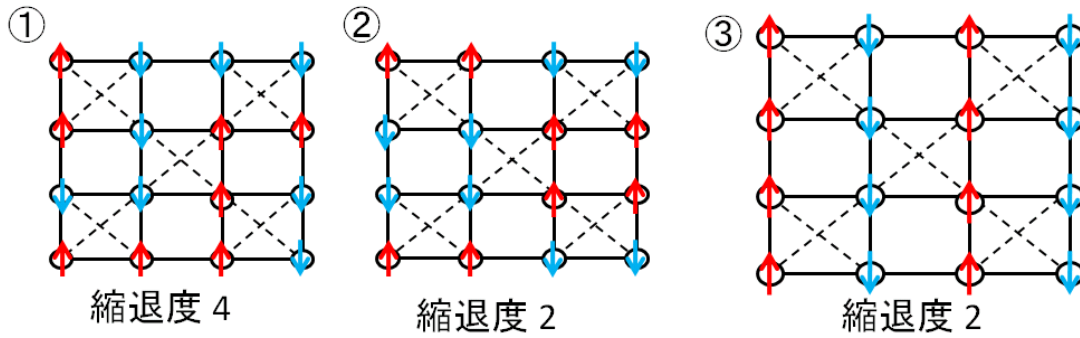


図 47 half-filling で  $t' > t$ 、 $U \neq 0$  の時の spin stripe 相における基底状態の電子配置

## 6 結論

サイト数  $N = 8, 16$  のチェッカーボード格子上的ハバードモデルを数値対角化の方法によって研究し、quarter-filling、half-filling における系の基底状態の振る舞いを、スピン相関関数から考察した。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 相がやや強く表れていることを示唆する結果が得られた。更に、その他の filling、 $t'$ 、 $U$  を変化させたときの系の基底状態の相図、スピン相関関数の振る舞いも同様に数値対角化による計算を行った。

今後の課題としては、スピン相関関数の他に密度の相関関数を計算して基底状態の情報を増やす等して、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。しかし、後者については厳密対角化可能なサイズに制限があるため、より大きいサイズの系の対角化は困難で、別のアルゴリズムが必要とされている。

## 付録 A グラフ理論の基本的な用語について

ここでは、グラフ理論に関して、今回の計算に必要な基礎的な部分を書く。

グラフ  $G$  は  $V(G), E(G)$  (以下、特に混同する恐れがない時は  $V, E$  と省略する) の集合からなっており、 $G = (V, E)$  と表す。この  $V$  の元  $v_i$  を vertex、 $E$  の元  $e_i$  を edge と呼ぶ\*4。それぞれの要素数を  $|V|, |E|$  で表し、それらは vertex と edge の数である。vertex  $v_i$  と  $v_j$  が edge  $e_i$  で結ばれているとき、 $v_i$  と  $v_j$  を  $e_i$  の端点と呼ぶ。edge の端点はその edge に、edge はその端点に接続しているという。1 つの edge の両端点は隣接しているといい、同一の vertex に接続している 2 つの edge は隣接しているという。端点が等しい edge を loop という。

### 接続行列と隣接行列について

グラフ  $G$  において、vertex  $v_i$  が edge  $e_j$  に接続する数を  $B_{v_i e_j}$  とすると、行列  $B = (B_{v_i e_j})$  を定義することができて、これをグラフ  $G$  の接続行列と呼ぶ。このようにすると、定義から接続行列の列に関して、

$$\sum_i B_{v_i e_j} = 2 \quad (\text{A.1})$$

が成立する。更にこれより

$$\sum_{ij} B_{v_i e_j} = 2|E| \quad (\text{A.2})$$

が成立する。

また、 $v_i, v_j$  が隣接している時、その数を  $A_{v_i v_j}$  として、行列  $A = (A_{v_i v_j})$  を定義する。これをグラフ  $G$  の隣接行列と呼ぶ。この  $A$  の列に関して、

$$\sum_i A_{v_i v_j} = n(v_j) \quad (\text{A.3})$$

は、 $v_j$  に接続する edge の数を表している。接続行列  $B$ 、隣接行列  $A$  の関係の例を図 48 に示す。

### 部分グラフについて

グラフ  $G$  と  $H$  について、 $V(H) \subseteq V(G), E(H) \subseteq E(G)$  であるとき、 $H$  を  $G$  の部分グラフ

---

\*4 本当は、これに加えて vertex と edge の接続の仕方を表す接続関数  $\phi_G(e) = vv'$  も含めて  $G = (V, E, \phi_G)$  と定義する必要があるが、今回は vertex と edge の接続の番号付けは、 $G$  を定義する時に適切に図示等で示すこととして、 $\phi_G(e)$  はあらわに書かないことにする

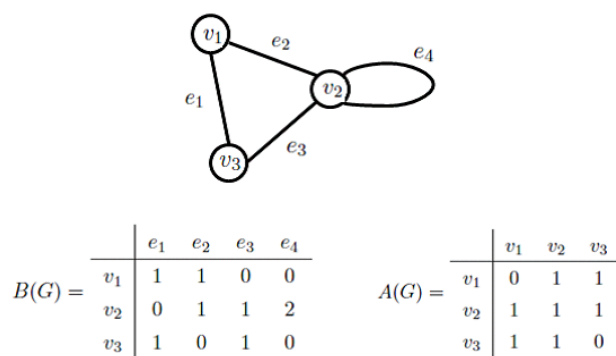


図 48 グラフ  $G$  と接続行列  $B$ 、隣接行列  $A$  の関係の例。この  $G$  は  $e_4$  が loop である。

といい、 $H \subseteq G$  と表す。更に、 $H \subseteq G$  で、 $V(H) = V(G)$  である部分グラフ  $H$  を  $G$  の全域部分グラフ (spanning subgraph) という。部分グラフの例は図 49 である。

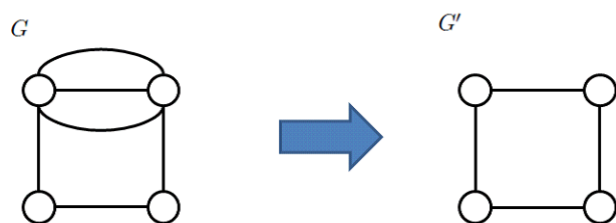


図 49 グラフ  $G$  と spanning subgraph  $H$  の例

### 歩道、小径、サイクルについて

グラフ  $G$  において交互列  $W = v_1 e_1 v_2 e_2 \cdots e_k v_{k+1}$  を  $v_1$  から  $v_{k+1}$  への歩道という。ここで歩道の長さは  $k$  であるとする。edge  $e_1, e_2, \dots, e_k$  が全て異なる歩道は小径と呼ばれる。この場合小径の長さは  $W$  における edge の数である。

そして、始点と終点が一致している小径を閉小径といい、その中でも、内点が全て異なる閉小径をサイクルという。

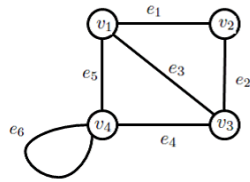
$k$  個の異なる vertex と edge で作られるサイクルを  $k$ -サイクルといい、特に  $k$  が偶 (奇) 数の場合を even(odd) サイクルという。閉小径とサイクルの例を図 50 に示す。

### 道、連結について

グラフ  $G$  において  $v_1$  から  $v_{k+1}$  への歩道  $W$  について、edge  $e_1, e_2, \dots, e_k$  が全て異なる場合、小径と呼ぶと前に述べたが、それに加えて vertex  $v_1, v_2, \dots, v_{k+1}$  も全て異なる場合、その歩道を  $v_1$  から  $v_{k+1}$  への道という。

$G$  の vertex について、 $v_i$  から  $v_j$  への道があれば、 $v_i$  は  $v_j$  に連結されるという。これにより、





閉小径:  $v_1e_1v_2e_2v_3e_4v_4e_6v_4e_5v_1$   
 サイクル:  $v_1e_1v_2e_2v_3e_3v_1$

図 50 閉小径とサイクルの例

$V$  はお互いが連結されている vertex で構成される集合  $V_1, V_2, \dots, V_\omega$  分割できる。部分グラフ  $G(V_1), G(V_2), \dots, G(V_\omega)$  を  $G$  の成分という。  $G$  の成分の数を  $\omega(G)$  とすると、  $\omega(G) = 1$  の時、  $G$  は連結であるといい、 そうでなければ非連結という (図 51)。

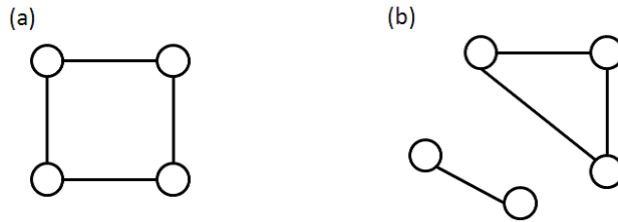


図 51 (a) 連結グラフ (b) 2 個の成分を持つ非連結グラフ

木 (tree) について

サイクル持たない連結グラフを木 (*tree*) という。 *tree* の任意の 2 つの vertex はちょうど 1 つの道によって連結される。

[証明]

背理法で証明する。  $G$  を *tree* として、異なる  $v_i$  から  $v_j$  への道  $P_1, P_2$  があるとする。 そうすると、  $P_1$  上にあって  $P_2$  上にはない edge  $e = v_kv_l$  がある。  $P_1 \cup P_2 - e$  は連結であるので、この中に 1 つの  $v_k$  から  $v_l$  への道  $P$  を含む。 すると  $P + e$  はサイクルとなるので、  $G$  が *tree* であることに矛盾する。 よって、 *tree* の任意の 2 つの vertex はちょうど 1 つの道によって連結される。 [証明終]

また、  $G$  が *tree* ならば、  $|E| = |V| - 1$  が成立する。

[証明]

$|V|$  についての帰納法で証明する。 $|V| = 1$  の時は明らか。

$|V| < k$  ( $k \leq 2$ ) の全ての tree について成立すると仮定する。

$G$  を  $|V| = k$  の tree とし、 $v_i, v_j$  に接続する edge を  $e$  とすれば、 $G - e$  は  $v_i$  から  $v_j$  への道を持たない。よって、 $G - e$  は非連結で、 $\omega(G - e) = 2$  である。この 2 つの成分を  $G_1, G_2$  とすると、この 2 つはそれぞれ tree である。また、それらの vertex の数は  $k$  より小さいので、仮定を用いることができ、

$$|E(G_1)| = |V(G_1)| - 1, \quad |E(G_2)| = |V(G_2)| - 1 \quad (\text{A.4})$$

が成立する。これより

$$\begin{aligned} |E(G)| &= |E(G_1)| + |E(G_2)| + 1 \\ &= |V(G_1)| + |V(G_2)| - 1 \\ &= |V(G)| - 1 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

となる。 [証明終]

」

## 謝辞

私の修士課程の研究に関して、大変興味深いテーマを与えてくださり、終始熱心なご指導を賜り、本論文作成の際、親身なご助言をいただいた指導教員の上田和夫先生に心より感謝を申し上げます。また、研究を進める際に適切なお助言をいただいた、同研究室の藤井達也さんに御礼申し上げます。そして研究を進める際、プログラミングや物理等において時間を惜しまず議論をしていただいた同研究室の桐野俊輔さん、高田研究室の堀知新さん、同研究室の屋敷賢さん、加藤研究室の阿部弘幸さんに感謝いたします。また、学生生活において、身の回りのお世話をしてくださった秘書の江口浩子さんに御礼申し上げます。どうもありがとうございます。

## 参考文献

- [1] J.Hubbard, Proc.Roy.Soc.A **276** 238(1963)
- [2] J.Hubbard, Proc.Roy.Soc.A **277** 237(1964)
- [3] J.Hubbard, Proc.Roy.Soc.A **281** 401(1964)
- [4] Nagaoka Y, Phys.Rev.**147** 392(1966)
- [5] Thouless D Proc.Phys.Soc.**86** 893(1965)
- [6] W.O.Putikka, M.U.Lunchini, and M.Ogata, Phys.Lev.Lett **69** 2228(1992)
- [7] W.O.Putikka, M.U.Lunchini, and T.M.Rice, Phys.Lev.Lett **68** 538(1992)
- [8] J.A.Riera and A.P.Young, Phys.Lev.B **40** 5285(1989)
- [9] Federico Becca and Sandro Sorella, Phys.Rev.Lett **86** 3396(2001)
- [10] A.Mielke, J.Phys.A:Math.Gen.**24** L73-L77(1991)
- [11] A.Mielke, J.Phys.A:Math.Gen.**24** 3311-3321(1991)
- [12] A.Mielke, J.Phys.Lett.A **174** 443(1993)
- [13] Hal Tasaki, Progress of Theoretical Physics **99** 489(1998)
- [14] K.Kusakabe and H.Aoki,*Physica B* **194 – 196** 215(1994)
- [15] T.Takeda, M.Nagata, H.Kobayashi, R.Kanno, Y.Kawamoto, M.Takano, T.Kamiyama, F.Izumi, and A.W.Sleight, J.Solid State Chem **140** 1998(182)
- [16] H.Sakai, M.Kato, K.Yoshimura, and K.Kosuge, J.Phys.Soc.Jpn **71** (2002)422
- [17] Yoshioka, and Koga, Kawakami, J.Phys.Soc.Jpn.**77** 104702(2008)
- [18] Yoshida, and Koga, Kawakami, Phys.Rev.B **78** 165113(2008)