

2013年3月

1/5 周期欠損型正方格子ハバードモデルにおける磁気相図の決定

物質系専攻 47-116031 都村 正樹

指導教員：上田 和夫（教授）

キーワード：1/5 周期欠損型正方格子、ハバードモデル、ハートリー-フォック近似、金属強磁性

1 序論

金属強磁性の問題は、これまで長い間様々な観点から研究されてきた。この問題の本質は、金属中で遍歴する電子の運動エネルギーと電子間斥力との競合という多体問題である。金属強磁性を考える時の最も簡単なモデルとして、ハバードモデルがある。しかし、ハバードモデルにおける金属強磁性の研究で、厳密に強磁性が基底状態になることが分かっているのは、以下の2例のように限られている。1例目は長岡の強磁性 [1] である。クーロン相互作用 $U \rightarrow \infty$ の時、half-filling から電子を一つ抜くと、ある種の格子では基底状態が強磁性であることが知られている。2例目は、Mielke, Tasaki [2] のフラットバンド強磁性である。適当な電子数であれば、格子構造に幾何学的フラストレーションがあって、フラットバンドがある場合に、フェルミ面上にバルクの大きさの縮退があると、フェルミ面上の多数の電子がスピンを揃えることにより、クーロン斥力を避けるために、強磁性が実現する。

一方で、1/5 周期欠損型正方格子と呼ばれる模型がある。この格子構造は、層状物質 CaV_4O_9 において二次元面の V イオンが作る格子である。 CaV_4O_9 では、V イオンが $S = 1/2$ のスピンを持っており、電子数密度は half-filling で、絶縁体である。従って、 CaV_4O_9 の磁気的性質を理論的に調べるために、ハバードモデルの有効模型であるハイゼンベルグモデルが用いられた。ハイゼンベルグモデルはハバードモデルにおいて、電子数密度 $n = 1$ でクーロン相互作用 $U \gg$ 跳び移り積分 t の極限を取った時に得られる。1/5 周期欠損型正方格子は2つの幾何学的に非等価な交換相互作用 J_0, J_1 を持っている。このため、 J_0, J_1 の比を変えた時、この格子模型は幾何学的フラストレーションがないにも関わらず、量子相転移を2回起こす。この系は、 $J_1 \gg J_0$ の時、bond-singlet が安定であり、 $J_0 \gg J_1$ の時は plaquette-singlet が安定である。 $J_0 = J_1$ の時は、反強磁性絶縁体である。先行研究によると、 CaV_4O_9 は、plaquette-singlet が基底状態であることが分かっている。

以上の背景から、研究動機は2つである。1つ目は、金属強磁性の探索である。2つ目は、1/5 周期欠損型正方格子における磁気秩序を、先行研究のハバードモデルの特殊な極限であるハイゼンベルグモデルから、一般的な遍歴電子モデルであるハバードモデルに一般化して調べることである。そこで、本研究では以下に述べる手掛かりをもとに、研究目的を設定した。一般に、格子模型は反強磁性になりやすい。しかし、これまでの研究の歴史から、half-filling の時は反強磁性の傾向が強く、quarter-filling の時は強磁性の傾向が強いことが知られている。また、電子の遍歴性は、half-filling より quarter-filling の方が強い。そこで、本研究では、結晶構造を 1/5 周期欠損型正方格子に設定し、電子数密度を先行研究の half-filling から quarter-filling に設定することにした。磁気秩序は、相互作用パラメーター U と t に依存して発現する。系の磁気秩序を完全に記述する磁気相図は、系の磁気秩序を理解するのに最適である。以上のことから、本研究では、1/5 周期欠損型正方格子における quarter-filling のハバードモデルを、ハートリー-フォック近似の範囲で調べることによって、磁気相図を決定することを研究目的に設定した。

本研究では 1/5 周期欠損型正方格子における 4 つの磁気秩序相 (図 1 ~ 図 4) に関して、自由エネルギーと磁化を数値計算し、磁気相図を決定する。

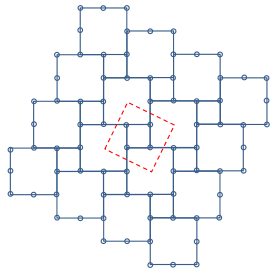


図 1: 常磁性相

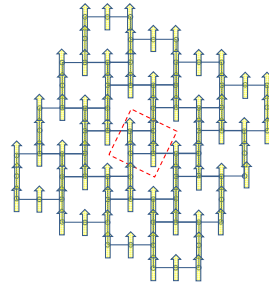


図 2: 強磁性相

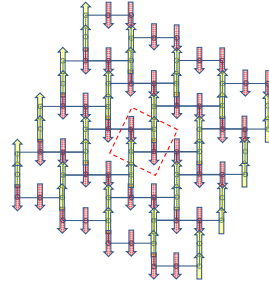


図 3: 反結合軌道の
反強磁性相

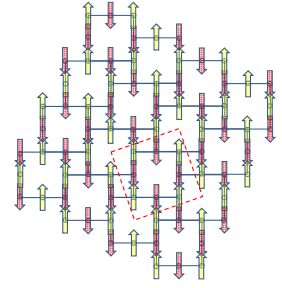


図 4: bipartite 格子の
反強磁性相

2 ハミルトニアンと手法

格子定数 a ($a = 1$ とする)、格子点の数 N 、単位胞の数 L^2 からなる $1/5$ 周期欠損型正方格子上の常磁性相と強磁性相をハバードモデルで考える (図 5)。境界条件は周期的境界条件とする。このハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
 H = & t_1 \sum_{i,j,\sigma} \left(c_{ijB\sigma}^\dagger c_{ijA\sigma} + c_{ijD\sigma}^\dagger c_{ijA\sigma} + c_{ijC\sigma}^\dagger c_{ijB\sigma} + c_{ijC\sigma}^\dagger c_{ijD\sigma} + h.c. \right) \\
 & + t_2 \sum_{i,j,\sigma} \left(c_{ij-1C\sigma}^\dagger c_{ijA\sigma} + c_{i+1jD\sigma}^\dagger c_{ijB\sigma} + c_{ij+1A\sigma}^\dagger c_{ijC\sigma} + c_{i-1jB\sigma}^\dagger c_{ijD\sigma} \right) \\
 & + U \sum_{i,j} (n_{ijA\uparrow} n_{ijA\downarrow} + n_{ijB\uparrow} n_{ijB\downarrow} + n_{ijC\uparrow} n_{ijC\downarrow} + n_{ijD\uparrow} n_{ijD\downarrow}) \\
 & + (1/2) g \mu_B B \sum_{i,j} ((n_{ijA\uparrow} - n_{ijA\downarrow}) + (n_{ijB\uparrow} - n_{ijB\downarrow}) + (n_{ijC\uparrow} - n_{ijC\downarrow}) + (n_{ijD\uparrow} - n_{ijD\downarrow}))
 \end{aligned} \tag{1}$$

である。ここで、 $c_{ij\alpha\sigma}^\dagger$ ($c_{ij\alpha\sigma}$) は、生成 (消滅) 演算子であり、 (i, j) の単位胞に属する α ($\alpha = A, B, C, D$) の副格子にいるスピン σ の電子についてのものである。また、 t_1, t_2 は幾何学的に非等価な跳び移り積分であり、 U はクーロン相互作用、 B は外部磁場、 g は g 因子、 μ_B はボーア磁子、 $n_{ij\alpha\sigma} = c_{ij\alpha\sigma}^\dagger c_{ij\alpha\sigma}$ である。このハミルトニアンについて、ハートリー-フォック近似の範囲で磁化と自由エネルギーを数値計算する。そして、4つの磁気秩序相における自由エネルギーを比較することにより、磁気相図を決定する。

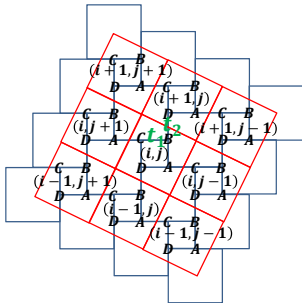


図 5: 常磁性相と強磁性相に関する式 (1) との対応

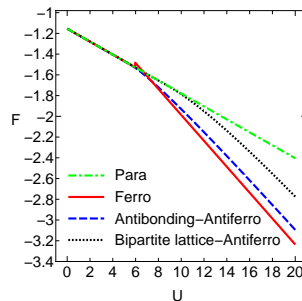


図 6: $t_1 = t_2 = 1$ の時の $U - F$ 図

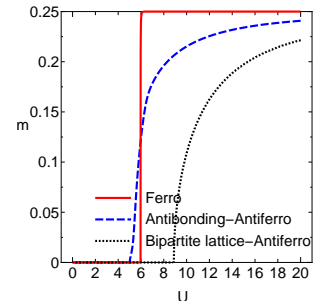


図 7: $t_1 = t_2 = 1$ の時の $U - F$ 図

3 結果

$t_1 = t_2 = 1$ における $U - F$ 図と $U - m$ 図を図 6、図 7 に示す。実線は U を下げた時の常磁性-強磁性転移、破線は U を下げた時の常磁性-反結合軌道の反強磁性転移、点線は U を下げた時の常磁性-bipartite 格子の反強磁性転移、一点鎖線は常磁性の自由エネルギーを表す。この計算を各 t_1, t_2 の組について、同様にして計算し、決定した磁気相図が図 8 である。図 8 において、FM は強磁性金属、FI は強磁性絶縁体、AFM は反結合軌道の反強磁性金属、AFI は反結合軌道の反強磁性絶縁体、PM は常磁性金属、PI は常磁性絶縁体、AFI' は AFI とは違う反結合軌道の反強磁性絶縁体を表し、実線は 1 次転移、点線は 2 次転移を表す。

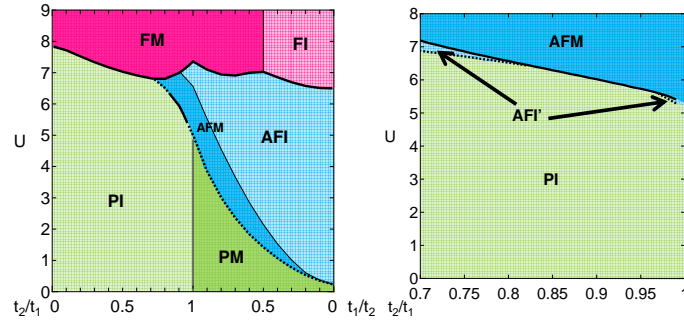


図 8: 磁気相図 (左) と $0.7 < t_2/t_1 < 1$ の領域の拡大図 (右)

4 結論

$1/5$ 周期欠損型正方格子における quarter-filling のハバードモデルを、ハートリー-フォック近似の範囲で調べることによって、 U 、 t_1 、 t_2 に関する磁気相図を決定した。本研究のモデルは、常磁性相と強磁性相と反結合軌道の反強磁性相の 3 つの相があり、bipartite 格子の反強磁性相は安定ではない。また、 U が大きく $t_1/t_2 > 0.5$ の領域では、金属強磁性が起こることが分かった。強磁性は全て完全強磁性である。強磁性は完全強磁性であるが、反強磁性の副格子磁化は飽和していない。このことから、電子相関をより厳密に扱った場合に、強磁性の安定領域は小さくなり得る。本研究では、 t_1/t_2 が大きくなるにつれて、強磁性が反結合軌道の反強磁性より安定化していき、 t_1/t_2 が小さくなるにつれて、強磁性と反結合軌道の反強磁性とのエネルギー差は小さくなっていく。これも、電子相関を厳密に扱うと、変更されるだろう。常磁性相、強磁性相、反結合軌道の反強磁性相の 3 つの相内で金属絶縁体転移がある。この 3 つの金属絶縁体転移は全て Lifshitz 転移である。以上のように、 $1/5$ 周期欠損型正方格子における quarter-filling のハバードモデルの基底状態は、多様な磁気秩序を示す興味深い系であることが明らかになった。

参考文献

- [1] Nagaoka Y, Phys.Rev.147 392 (1966).
- [2] A.Mielke, J.Phys.A:Math.Gen.24 L73-L77 (1991).
- [3] I. M. Lifshitz: Sov. Phys. JETP 11 (1960) 1130 [Zh. Eksp. Teor. Fiz. 38 (1960) 1569].