

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 24 年度

修士論文

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

2013 年 1 月 29 日提出  
指導教員：上田 和夫 教授 印

47-116031：都村 正樹

# 目次

<b>1</b>	<b>序論</b>	<b>1</b>
1.1	金属強磁性とハバードモデル	1
1.2	1/5 周期欠損型正方格子と先行研究	2
1.3	研究の動機と目的	4
<b>2</b>	<b>研究手法</b>	<b>5</b>
2.1	1/5 周期欠損型正方格子ハバードモデルの有力な磁気秩序相	5
2.1.1	常磁性相	5
2.1.2	強磁性相	6
2.1.3	反結合軌道の反強磁性相	7
2.1.4	bipartite 格子の反強磁性相	8
2.2	ハートリー-フォック近似	9
2.2.1	常磁性相と強磁性相	9
2.2.2	反結合軌道の反強磁性相と bipartite 格子の反強磁性相	14
2.3	数値計算	15
<b>3</b>	<b>結果</b>	<b>16</b>
3.1	エネルギーと磁化の数値計算と安定相の決定	16
3.2	磁気相図	20
3.3	反結合軌道の反強磁性と bipartite 格子の反強磁性	24
3.4	金属絶縁体転移	26
3.4.1	常磁性相の金属絶縁体転移	26
3.4.2	強磁性相の金属絶縁体転移	31
3.4.3	反強磁性相の金属絶縁体転移	34
<b>4</b>	<b>結論</b>	<b>38</b>
	<b>付録</b>	<b>39</b>
<b>A</b>	<b>各 <math>t_1, t_2</math> における <math>U - F</math> 図と <math>U - m</math> 図の数値計算結果</b>	<b>39</b>
	<b>謝辞</b>	<b>49</b>
	<b>参考文献</b>	<b>50</b>

# 1 序論

## 1.1 金属強磁性とハバードモデル

物質は磁性体と非磁性体に大別でき、また金属と絶縁体に大別することができる。その中でも、金属であり、かつ強磁性を示す物質群がある。これは「金属強磁性」として知られ、これまで長い間様々な観点から研究されてきた。金属強磁性の問題は、電流を流すことができる導体において、数多くの電子が自発的にスピンを揃えながら流れる現象を解明することである。これは、遍歴電子強磁性と呼ばれ、多数の電子の跳び移りと、電子間のクーロン相互作用による反発を考えなければならぬ。つまり、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の多体問題である。これは、絶縁体の磁性体のように、局在スピンの交換相互作用を考える問題のように単純ではない。このため、金属強磁性の問題は、強相関電子系分野で、今日でも古くて新しい問題として、活発に研究されている。

遍歴電子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。これは、各原子（各サイト）に1つずつ局在軌道があり、電子に許される運動は、局在軌道間の跳び移りである。この電子の跳び移りを tight-binding 近似で考えた模型に、短距離斥力を導入したものがハバードモデルである。

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は、以下の2例以外には知られていない。1つ目が長岡の強磁性 [1][2] である。 $U \rightarrow \infty$  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つ目は、Mielke, Tasaki [3][4][5][6] 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つて、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。

このように、ハバードモデルのような格子模型による金属強磁性の研究は、活発に研究されているが、余り進んでいるとは言えない状況である。

## 1.2 1/5 周期欠損型正方格子と先行研究

格子模型において、1/5 周期欠損型正方格子と呼ばれる模型がある。この格子模型を図 1 に示す。この格子模型は、層状物質  $\text{CaV}_4\text{O}_9$  において二次元面の V イオンが作る格子である。 $\text{CaV}_4\text{O}_9$  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、 $\text{CaV}_4\text{O}_9$  の磁氣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  $U \gg t$  の極限を取った時に得られる。

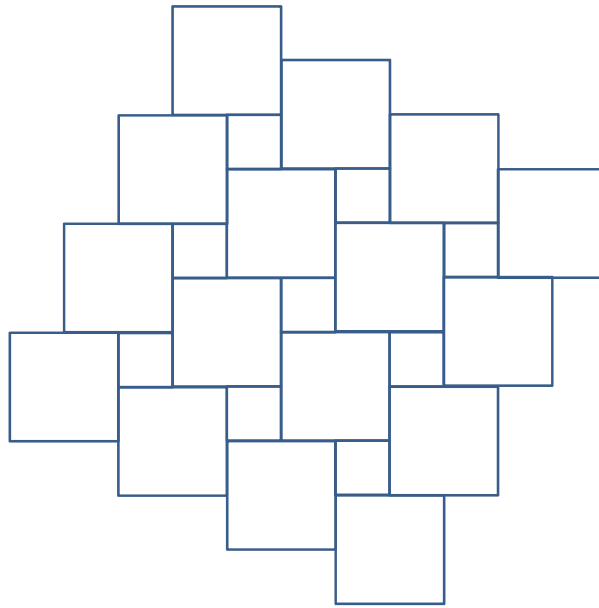


図 1: 1/5 周期欠損型正方格子

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。(図 2) 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。(図 3) 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。bond-singlet と plaquette-singlet の概念図を図 4 に示す。plaquette-singlet は、対角線上にある 2 つのスピンがトリプレットを作っており、この対角線上にある 2 つのトリプレットがシングレットを作っている状態のことを言う。 $J_0 = J_1$  の時は、反強磁性絶縁体である。先行研究によると、 $\text{CaV}_4\text{O}_9$  は、plaquette-singlet が基底状態であることが分かっている。

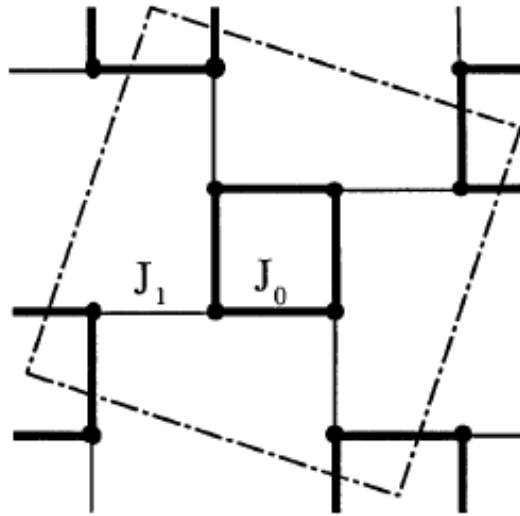


図 2: 2つの幾何学的に非等価な交換相互作用 [7]

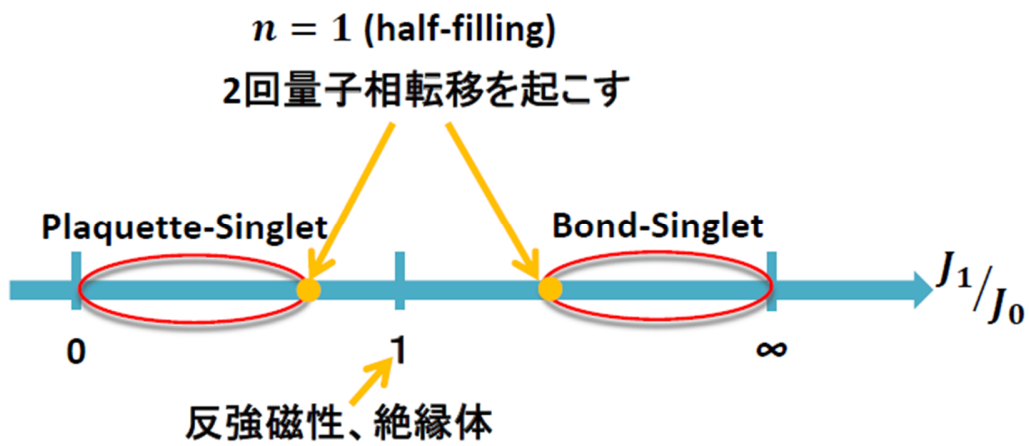


図 3: 2回量子相転移を起こすこと概念図

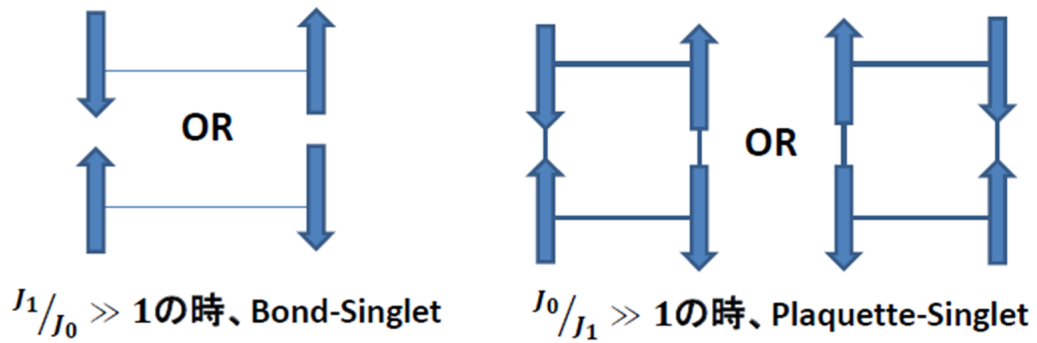


図 4: bond-singlet と plaque-singlet の概念図

### 1.3 研究の動機と目的

本研究は2つの事を動機として始められた。1つ目は、金属強磁性を基底状態として持つ格子モデルの探索である。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とし、電子数も変えてその性質を調べることである。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。

金属強磁性をハバードモデルに見出す際の試みとして、大きく分けて以下の3つ方法がある。

- 各サイトあたりの電子数密度を変える方法
- 結晶構造を変える方法
- 相互作用パラメーター  $U$  と  $t$  ( $U$ : onsite のクーロン相互作用,  $t$ : サイト間の跳び移り積分) を変える方法

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、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。

また、反強磁性は、正方格子から格子を抜くと弱くなることが知られている。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。

以上の手掛かりをもとに、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。

## 2 研究手法

### 2.1 1/5 周期欠損型正方格子ハバードモデルの有力な磁気秩序相

以下に、本研究で調べた4つの磁気秩序相を述べる。

#### 2.1.1 常磁性相

常磁性相を図5に示す。赤の破線は単位胞を表す。この単位胞は、1/5 周期欠損型正方格子における最小の単位胞である。常磁性相のスピンは、無秩序である。

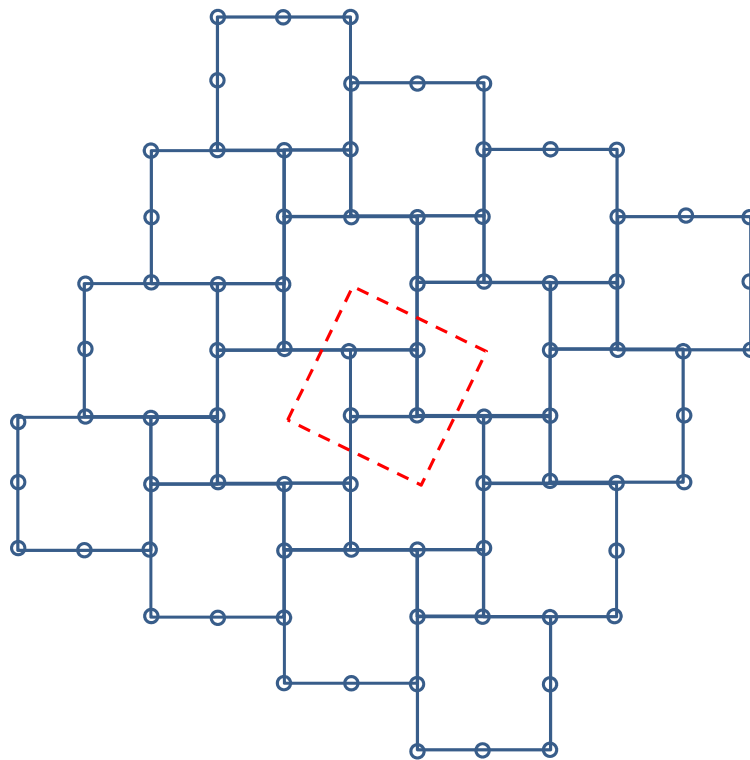


図 5: 常磁性相の模式図

### 2.1.2 強磁性相

強磁性相を図6に示す。この単位胞は、 $1/5$ 周期欠損型正方格子における最小の単位胞である。強磁性相のスピンは、偏極している。

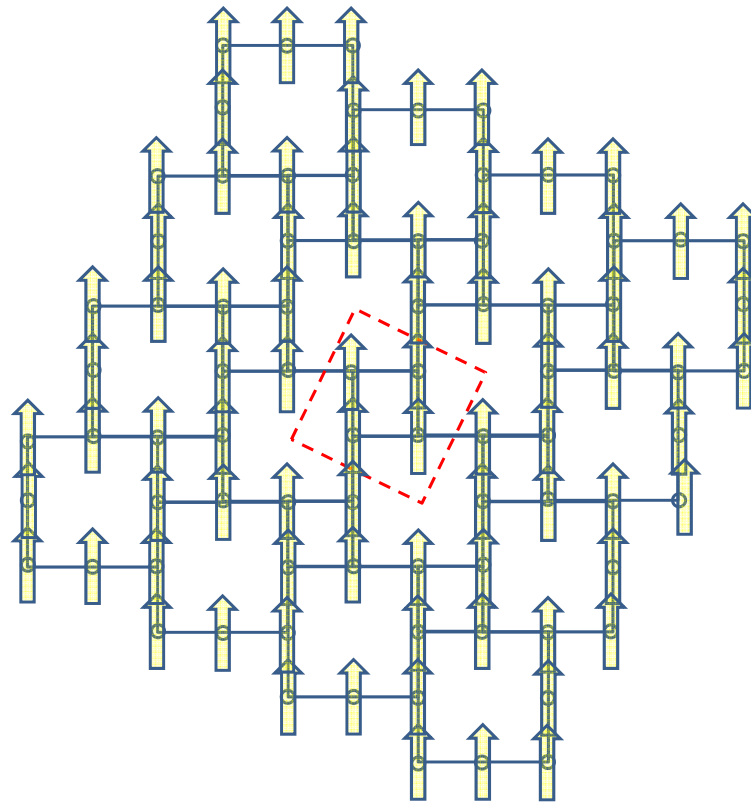


図 6: 強磁性相の模式図



### 2.1.3 反結合軌道の反強磁性相

反結合軌道の反強磁性相を図7に示す。この単位胞は、 $1/5$ 周期欠損型正方格子における最小の単位胞である。反結合軌道の反強磁性相のスピンは、単位胞内の隣り合うスピンは反平行であるが、単位胞間で隣り合うスピンは平行である。この反強磁性相を反結合軌道の反強磁性相と名付けた理由は、単位胞間を結ぶボンドで作る反結合軌道に、スピンの反平行に詰まっている描像で理解できるからである。(詳細は3.3節)

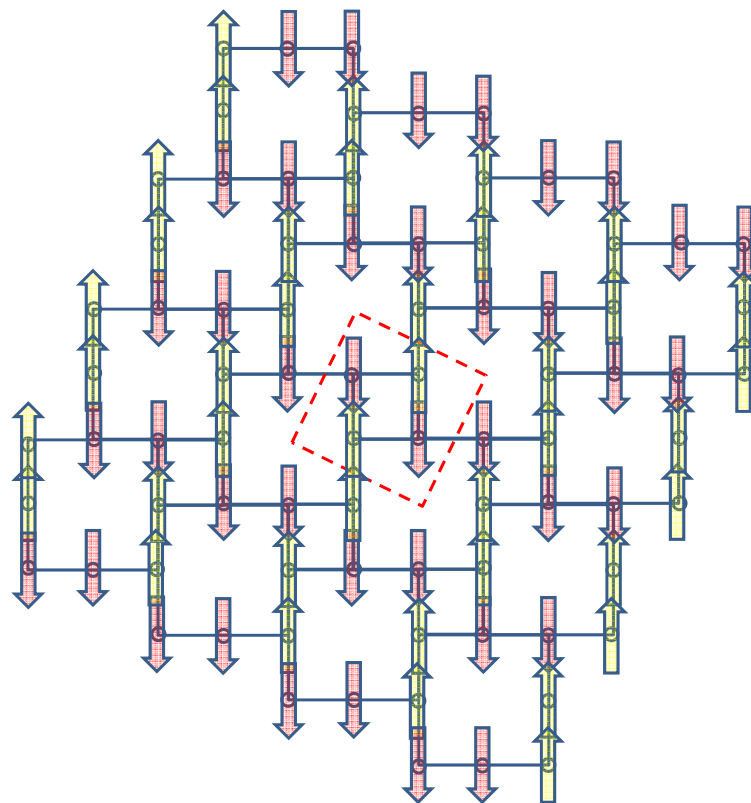


図7: 反結合軌道の反強磁性相の模式図

#### 2.1.4 bipartite 格子の反強磁性相

bipartite 格子の反強磁性相を図 8 に示す。この単位胞は、 $1/5$  周期欠損型正方格子における 2 番目に小さな単位胞である。bipartite 格子の反強磁性相のスピンは、隣り合うスピンの向きが反平行である。この反強磁性相を bipartite 格子の反強磁性相と名付けた理由は、スピンの向きに注目すれば、格子を 2 つの部分に分割できるからである。

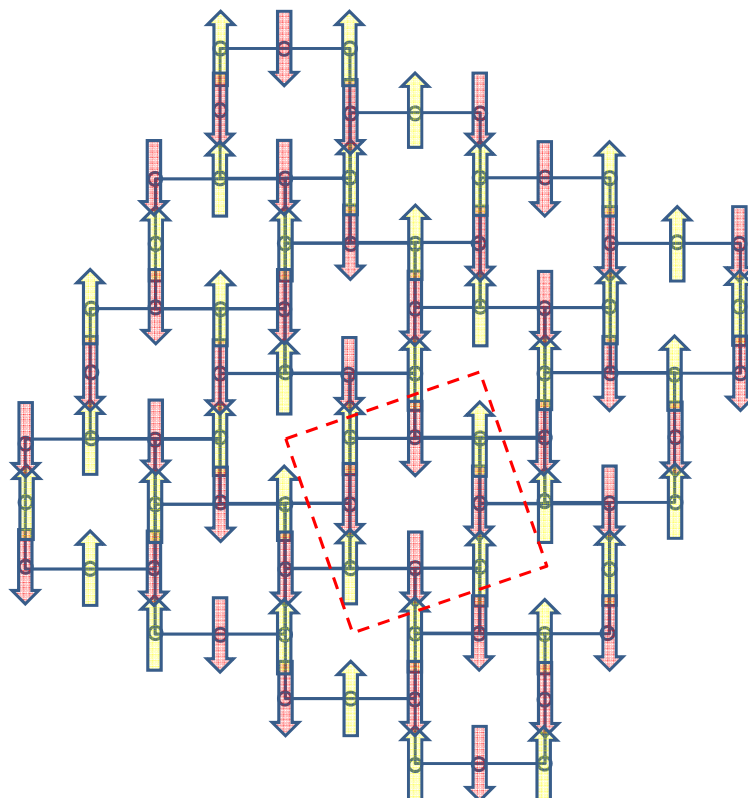


図 8: bipartite 格子の反強磁性相の模式図

## 2.2 ハートリー-フォック近似

### 2.2.1 常磁性相と強磁性相

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的常磁性相と強磁性相 (図 1) をハバードモデルで考える。境界条件は周期的境界条件とする。また、格子点の数と単位胞の数は、 $L^2 = N/4$  の関係がある。

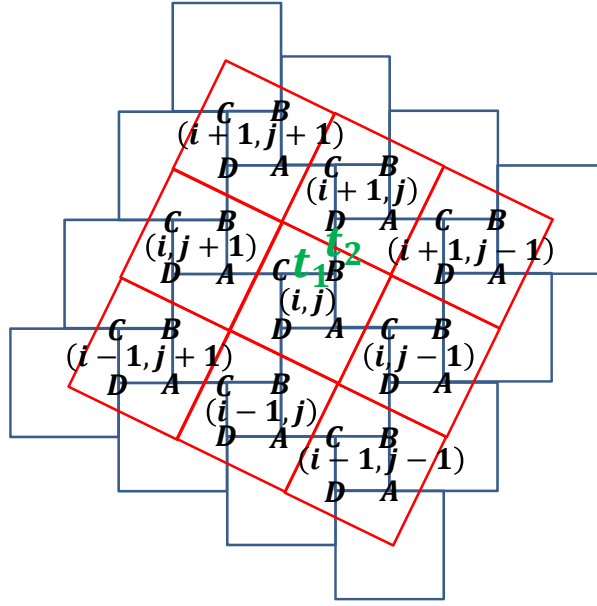


図 9: 常磁性相と強磁性相に関する式 (1) との対応

このハミルトニアンは以下で表される。

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

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  $\alpha$  ( $\alpha = A, B, C, D$ ) の副格子にいるスピン  $\sigma$  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、 $\mu_B$  はボーア磁子、 $n_{ij\alpha\sigma} = c_{ij\alpha\sigma}^\dagger c_{ij\alpha\sigma}$  である。

まず、 $H_K$  について考える。 $H_K$  を以下の式 (2) でフーリエ変換すると、

$$c_{ij\alpha\sigma}^\dagger = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{ij}}, \quad c_{ij\alpha\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{ij}} \quad (2)$$

式 (3) が得られる。

$$\begin{aligned} H_K &= t_1 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} + c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}D\sigma} + h.c. \right) \\ &+ t_2 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}_{ij-1})} c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}_{i+1j})} c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} \right. \\ &\left. + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}_{ij+1})} c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}C\sigma} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}_{i-1j})} c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}D\sigma} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、

$$\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_{ij-1} = (i, j) - (i, j-1) = (0, 1) \quad (4)$$

$$\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_{i+1j} = (i, j) - (i+1, j) = (-1, 0) \quad (5)$$

$$\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_{ij+1} = (i, j) - (i, j+1) = (0, -1) \quad (6)$$

$$\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_{i-1j} = (i, j) - (i-1, j) = (1, 0) \quad (7)$$

と、周期境界条件

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \left( \frac{2\pi}{L} n_x, \frac{2\pi}{L} n_y \right) = (k_x, k_y) \\ (n_x, n_y &= 0, 1, 2, 3, \dots, L-1) \end{aligned} \quad (8)$$

を使って、式 (3) を計算すると、式 (9) を得る。

$$\begin{aligned}
H_K &= t_1 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} + c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}D\sigma} + h.c. \right) \\
&+ t_2 \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( e^{ik_y} c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + e^{-ik_x} c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} + e^{-ik_y} c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}C\sigma} + e^{ik_x} c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}D\sigma} \right) \\
&= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 0 & t_1 & t_2 e^{-ik_y} & t_1 \\ t_1 & 0 & t_1 & t_2 e^{ik_x} \\ t_2 e^{ik_y} & t_1 & 0 & t_1 \\ t_1 & t_2 e^{-ik_x} & t_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A\sigma} \\ c_{\mathbf{k}B\sigma} \\ c_{\mathbf{k}C\sigma} \\ c_{\mathbf{k}D\sigma} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{9}$$

次に  $H_{int}$  について考える。エネルギーの単位を用いて磁場を測るために、 $b = g\mu_B B$  とおく。また、サイトあたりの電子数を  $n$ 、 $g\mu_B$  を単位としたサイトあたりの磁化を  $m$  とする。常磁性相と強磁性相の場合、電荷秩序がなく一様だと仮定すると、

$$n = \langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle + \langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle \tag{10}$$

であり、また、4 回対称で一様な磁化を仮定すると、

$$m = \frac{1}{2} (\langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle - \langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle) \tag{11}$$

である。式 (10)、式 (11) より、 $\langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle$ 、 $\langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle$  について解くと、

$$\langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle = \frac{1}{2} n - m \tag{12}$$

$$\langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} n + m \tag{13}$$

が得られる。ここで、ハートリー-フォック近似を相互作用の項に用いる。ハートリー-フォック近似とは、

$$\begin{aligned}
U n_{ij\alpha\uparrow} n_{ij\alpha\downarrow} &= U (\langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle + n_{ij\alpha\uparrow} - \langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle) (\langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle + n_{ij\alpha\downarrow} - \langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle) \\
&\cong U (\langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle n_{ij\alpha\uparrow} + \langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle n_{ij\alpha\downarrow} - \langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle \langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle)
\end{aligned} \tag{14}$$

と近似し、ゆらぎの項である  $(n_{ij\alpha\uparrow} - \langle n_{ij\alpha\uparrow} \rangle) (n_{ij\alpha\downarrow} - \langle n_{ij\alpha\downarrow} \rangle)$  を無視するものである。ゆらぎの項の期待値が小さい時に正当化され、金属強磁性の基底状態を考える時の最も簡単な方法である。しかし、ハートリー-フォック近似は強磁性の安定

性を過大評価しており、実際は電子相関をもっと厳密に扱わなければならない。相互作用の項をハートリー-フォック近似し、式(12)、式(13)を用いて、 $H_{int}$ を定数項を除いて計算すると、

$$H_{int} = \left( Um + \frac{1}{2}b \right) \sum_{i,j,\sigma} ((n_{ijA\uparrow} - n_{ijA\downarrow}) + (n_{ijB\uparrow} - n_{ijB\downarrow}) + (n_{ijC\uparrow} - n_{ijC\downarrow}) + (n_{ijD\uparrow} - n_{ijD\downarrow})) \quad (15)$$

を得る。これを  $H_K$  と同様にフーリエ変換すると、

$$\begin{aligned} H_{int} &= \left( Um + \frac{1}{2}b \right) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \left( c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}A\sigma} + c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}B\sigma} + c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}C\sigma} + c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}D\sigma} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger \right) \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A\sigma} \\ c_{\mathbf{k}B\sigma} \\ c_{\mathbf{k}C\sigma} \\ c_{\mathbf{k}D\sigma} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (16)$$

となる。ここで、 $(Um + \frac{1}{2}b)\sigma = \frac{1}{2}(b + 2Um)\sigma = \frac{1}{2}\tilde{b}\sigma = A$ とおいた。この $\tilde{b}$ は、クーロン相互作用の影響を分子場として含めた実効的な磁場である。 $m = 0$ の時、常磁性相を表し、 $m \neq 0$ の時、強磁性相を表す。本研究では、外場 $b = 0$ の時の基底状態に関心があるので、 $\tilde{b} = 2Um$ である。

以上より、常磁性相と強磁性相の場合のハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} H &= H_K + H_{int} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger \right) \begin{pmatrix} A & t_1 & t_2 e^{-ik_y} & t_1 \\ t_1 & A & t_1 & t_2 e^{ik_x} \\ t_2 e^{ik_y} & t_1 & A & t_1 \\ t_1 & t_2 e^{-ik_x} & t_1 & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A\sigma} \\ c_{\mathbf{k}B\sigma} \\ c_{\mathbf{k}C\sigma} \\ c_{\mathbf{k}D\sigma} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (17)$$

と表される。これにより常磁性相と強磁性の波数空間でのハミルトニアンの行列表示を  $P$  とすると、

$$P = \begin{pmatrix} A & t_1 & t_2 e^{-ik_y} & t_1 \\ t_1 & A & t_1 & t_2 e^{ik_x} \\ t_2 e^{ik_y} & t_1 & A & t_1 \\ t_1 & t_2 e^{-ik_x} & t_1 & A \end{pmatrix} \quad (18)$$

と表されることがわかる。また、式 (17) のハミルトニアンは、以下のように書ける。

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( c_{\mathbf{k}A\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}B\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}C\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}D\sigma}^\dagger \right) \begin{pmatrix} A & t_1 & t_2 e^{-ik_y} & t_1 \\ t_1 & A & t_1 & t_2 e^{ik_x} \\ t_2 e^{ik_y} & t_1 & A & t_1 \\ t_1 & t_2 e^{-ik_x} & t_1 & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A\sigma} \\ c_{\mathbf{k}B\sigma} \\ c_{\mathbf{k}C\sigma} \\ c_{\mathbf{k}D\sigma} \end{pmatrix} \\
&= \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger H_\sigma(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma} \\
&= \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger U_\sigma(\mathbf{k}) U_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) H_\sigma(\mathbf{k}) U_\sigma(\mathbf{k}) U_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma} \tag{19}
\end{aligned}$$

ここで、 $U_\sigma(\mathbf{k})$  はユニタリー行列であり、これにより  $U_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) H_\sigma(\mathbf{k}) U_\sigma(\mathbf{k})$  は対角化される。式 (19) は、常磁性相と強磁性相の場合だけでなく、反結合軌道の反強磁性相の場合でも bipartite 格子の反強磁性相の場合でも同様に書ける。また、サイトあたりの電子数密度  $n$  とサイトあたりの磁化  $m$  は以下の式で計算できる。

$$n = \frac{1}{N_{\text{site}} \cdot L^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f(\epsilon_{\mathbf{k}\sigma}) = n(\mu, \tilde{b}) = \frac{1}{2} \tag{20}$$

$$m_\alpha = -\frac{1}{2} \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma |(U_\sigma(\mathbf{k})_{\alpha\sigma})|^2 f(\epsilon_{\mathbf{k}\sigma}) = m(\mu, \tilde{b}) \tag{21}$$

ここで、 $s$  は bandindex であり、 $f(\epsilon_{\mathbf{k}\sigma})$  はフェルミ分布関数

$$f(\epsilon_{\mathbf{k}\sigma}) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu}{k_B T}} + 1} \tag{22}$$

である。ハートリー-フォック近似では、 $n(\mu, \tilde{b}) = \frac{1}{2}$  となるよう、 $\mu$  を自己無撞着に決め、 $\tilde{b} = 2Um(\mu, \tilde{b})$  から、 $\tilde{b}$  を自己無撞着に決める。これにより求めた  $\mu$  と  $\tilde{b}$  を式 (21) とサイトあたりの自由エネルギー  $F$  の式

$$F = -\frac{k_B T}{N_{\text{site}} \cdot L^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \ln \left( 1 + e^{-\frac{1}{k_B T}(\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu)} \right) - U \left( \frac{n^2}{4} - m^2 \right) + \mu n \tag{23}$$

に代入することにより、 $m$  と  $F$  を求めることができる。

### 2.2.2 反結合軌道の反強磁性相と bipartite 格子の反強磁性相

反結合軌道の反強磁性相も bipartite 格子の反強磁性相も、常磁性相と強磁性相の場合と同様に、磁化  $m$  と自由エネルギー  $F$  を求めることができる。波数空間でのハミルトニアン の行列表示は、前者を  $Q$ 、後者を  $R$  とすると、

$$Q = \begin{pmatrix} A & t_1 & t_2 e^{-ik_y} & t_1 \\ t_1 & -A & t_1 & t_2 e^{ik_x} \\ t_2 e^{ik_y} & t_1 & A & t_1 \\ t_1 & t_2 e^{-ik_x} & t_1 & -A \end{pmatrix} \quad (24)$$

$$R = \begin{pmatrix} A & t_2 & 0 & t_1 e^{-ik_x} & 0 & 0 & 0 & t_1 \\ t_2 & -A & t_1 & 0 & 0 & 0 & t_1 e^{ik_x} & 0 \\ 0 & t_1 & A & t_2 & 0 & t_1 e^{ik_x} & 0 & 0 \\ t_1 e^{ik_y} & 0 & t_2 & -A & t_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_1 & A & t_2 & 0 & t_1 e^{ik_y} \\ 0 & 0 & t_1 e^{-ik_x} & 0 & t_2 & -A & t_1 & 0 \\ 0 & t_1 e^{-ik_x} & 0 & 0 & 0 & t_1 & A & t_2 \\ t_1 & 0 & 0 & 0 & t_1 e^{-ik_y} & 0 & t_2 & -A \end{pmatrix} \quad (25)$$

である。本研究では、各相における自由エネルギー  $F$  を求め、どの相が最安定かを比較することにより、磁気相図を決定する。



## 2.3 数値計算

本研究では、システムサイズ  $L^2$ 、単位胞にあるサイトの数  $N_{site} = 4 \text{ or } 8$ 、温度  $T$ 、quarter-filling  $n = 1/2$  で、ハートリー-フォック近似 (平均場近似) による  $\tilde{b}$  における自己無撞着方程式を計算し、自由エネルギーと磁化を計算する。以下では、その方法を述べる。数値計算では、まず  $\tilde{b}^{input}$ 、 $\mu^{input}$  を初期値として与える。 $\tilde{b}^{input}$  が与えられると、 $A = \frac{1}{2}\tilde{b}\sigma$  を通じて  $H_\sigma(\mathbf{k})$  が決まる。次に、 $H_\sigma(\mathbf{k})$  をハウスホルダ変換を行い、対角化を行う。これは、 $U_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) H_\sigma(\mathbf{k}) U_\sigma(\mathbf{k})$  が対角化されることに対応する。これにより、エネルギー固有値  $\epsilon_{\mathbf{k}s\sigma}$  とユリタリ-行列  $U_\sigma(\mathbf{k})$  が求まる。これらを式 (20)、式 (21) と  $\tilde{b} = 2Um$  に代入することにより、 $n^{output}$ 、 $m^{output}$ 、 $\tilde{b}^{output}$  が得られる。 $g_1$ 、 $g_2$  を

$$g_1 = \tilde{b}^{input} - \tilde{b}^{output} \quad (26)$$

$$g_2 = n - n^{output} \quad (27)$$

とおくと、 $g_1 = 0$  となるまで、初期値を変更して計算を繰り返すことによって  $\tilde{b}$  を決めることが、 $\tilde{b}$  の自己無撞着方程式を解くことに対応する。また、 $\tilde{b}$  の計算の繰り返しのたびに  $g_2 = 0$  となるように  $\mu$  を調節することが、電子数密度を quarter-filling に固定することに対応する。本研究では、 $g_1 \neq 0$ 、 $g_2 \neq 0$  の時、新たに  $\tilde{b}^{input}$  と  $\mu^{input}$  を与えて、式 (26)、式 (27) が満足されるまで上で述べた計算を繰り返すよう、プロイデン法 [8] を用いて数値計算する。この計算により最終的に求めた  $\tilde{b}^{final}$  と  $\mu^{final}$  を用いて、式 (21) と式 (23) を計算することにより磁化と自由エネルギーを計算する。(  $T = 0$  の時の内部エネルギーに興味があるが、計算の収束性が良くなるように、有限温度の時の自由エネルギーを計算する。本研究では、自由エネルギーと内部エネルギーを区別せず、単にエネルギーと呼ぶ )

### 3 結果

#### 3.1 エネルギーと磁化の数値計算と安定相の決定

システムサイズ  $L^2 = 200 \times 200$ 、温度  $T = 0.03$  ( $t_1/t_2 \geq 1$  の時は、 $t_2$  を単位とし、 $t_2/t_1 \geq 1$  の時は、 $t_1$  を単位とする。以下、温度  $T$  に関して同様) の条件下で、 $t_1 = t_2 = 1$  における  $U - F$  図と  $U - m$  図を図 10、図 11 に示す。

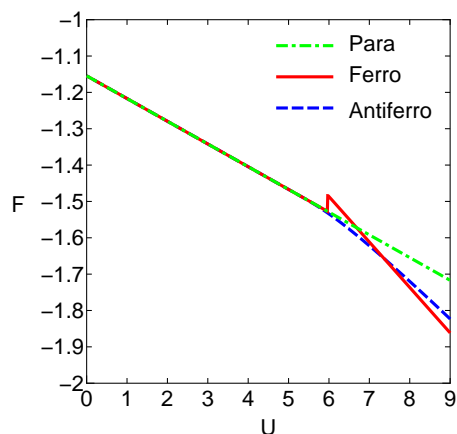


図 10:  $t_1 = t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

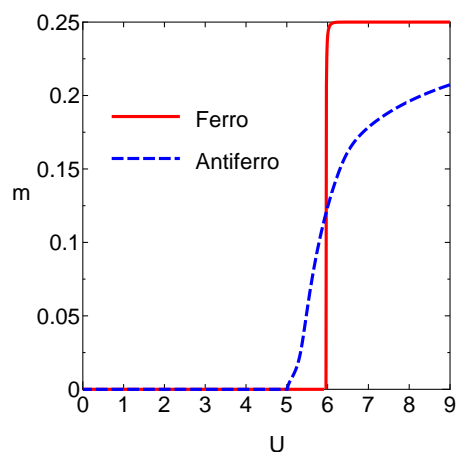


図 11:  $t_1 = t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

赤の実線は  $U$  を下げた時の常磁性-強磁性転移、青の破線は  $U$  を下げた時の常磁性-反結合軌道の反強磁性転移、緑の一点鎖線は常磁性のエネルギーを表す。図 10 において、各  $U$  に対してエネルギーが最も低い状態が基底状態である。よって、各  $U$  に対する基底状態を知るためには、エネルギーが最も低い状態を各  $U$  に対し

て見てやれば良い。赤の実線は、強磁性のエネルギーが常磁性のエネルギーに不連続にとぶヒステリシスがある。このことから、常磁性-強磁性転移は1次転移であることが分かる。また、図11の赤の実線において、磁化が不連続に立ち上がっている ( $U$  を 0.01 刻みで数値計算しているが、図では点を線で結んでいる) ので、常磁性-強磁性転移は1次転移である。常磁性-反結合軌道の反強磁性転移は、青の破線である反結合軌道の反強磁性のエネルギーが滑らかに常磁性のエネルギーに繋がっていることから、2次転移であることが分かる。また、平均場の範囲では、2次転移の秩序変数 (本研究では磁化のこと) は平方根の関数形で立ち上がるが、図11を見ると、平方根の関数形で立ち上がっている。強磁性-反結合軌道の反強磁性転移については、赤の実線と青の破線がクロスしているため、1次転移である。磁気相図を決定するにあたっては、 $t_1 = t_2 = 1$  の時、 $U$  を 9 から下げるにつれて、強磁性状態 反強磁性状態 常磁性状態とエネルギー最安定の状態が移っていくことが反映される。また、常磁性-強磁性転移は1次転移であるが、1次転移が起こっている  $U$  の領域では、強磁性が最安定ではないので、磁気相図には常磁性-強磁性転移が1次転移であることは反映されない。

$t_1 = 0.4, t_2 = 1$  における  $U-F$  図と  $U-m$  図を図12、図13に示す。 $t_1 = 0.4, t_2 = 1$  の時も、 $U$  を 9 から下げると、強磁性状態 反強磁性状態 常磁性状態とエネルギー最安定の状態が移っていく。ただし、 $t_1 = t_2 = 1$  の時と違って、常磁性-強磁性転移は、図12の  $U-F$  図を見ると、2次転移を示す。しかし、 $t_1 = t_2 = 1$  の時と同様、常磁性-強磁性転移が2次転移であることは、磁気相図には反映されない。 $t_1 = 1, t_2 = 0.4$  における  $U-F$  図と  $U-m$  図を図14、図15に示す。 $t_1 = 1, t_2 = 0.4$  の時は、 $U$  を 9 から下げるにつれて、強磁性状態 常磁性状態とエネルギー最安定の状態が移っていく。また、常磁性-強磁性転移が1次転移であることは、 $t_1 = t_2 = 1, t_1 = 0.4, t_2 = 1$  の時と同様、磁気相図には反映されない。他の各  $t_1, t_2$  の組について、同様にして  $U-F$  図と  $U-m$  図を数値計算した。その結果を付録Aに示す。各  $t_1, t_2$  について、数値計算を行ったが、収束しない点がある。その時は、波数点の数である  $L^2$  の数を増やして数値計算し、収束させた。

エネルギーの図を見ると、 $U$  が大きい範囲において、 $t_1$  が  $t_2$  より小さくなっていくと、強磁性と反結合軌道の反強磁性のエネルギーの差がなくなっていくが、逆に  $t_2$  が  $t_1$  より小さくなっていくと、強磁性と反結合軌道の反強磁性のエネルギーの差が大きくなっていく。このことから、 $U$  が大きい領域で、 $t_1 > t_2$  の時は強磁性が安定に存在しているが、 $t_1 \ll t_2$  の極限では、強磁性と反結合軌道の反強磁性が競合している可能性がある。実際に、本研究の数値計算では、 $t_1 = 0.01, t_2 = 1$  の時、 $U > 4.64$  の領域では、強磁性と反結合軌道の反強磁性のエネルギーは数値計算の範囲で完全に一致しており、縮退している。また、付録Aの強磁性の磁化を見ると、強磁性は完全強磁性である。磁化が飽和していない領域があるが、その領域において、強磁性が基底状態である領域は存在しない。よって、強磁性は、全て完全強磁性である。

なお、詳しくは3.3節で述べるが、bipartite 格子の反強磁性が安定な領域はない。

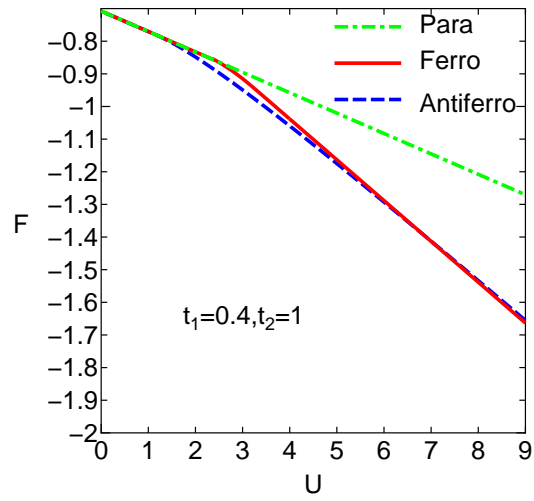


図 12:  $t_1 = 0.4, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

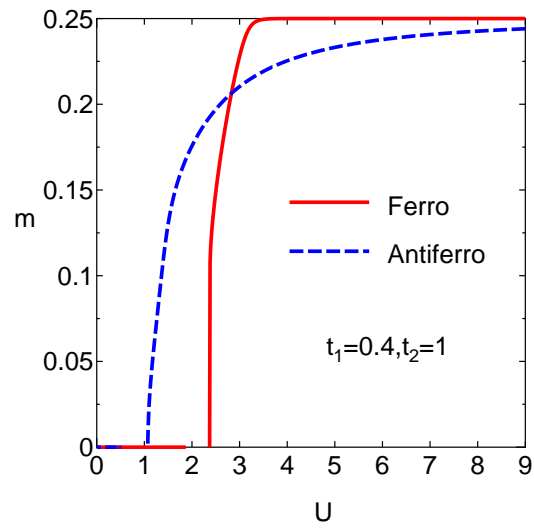


図 13:  $t_1 = 0.4, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

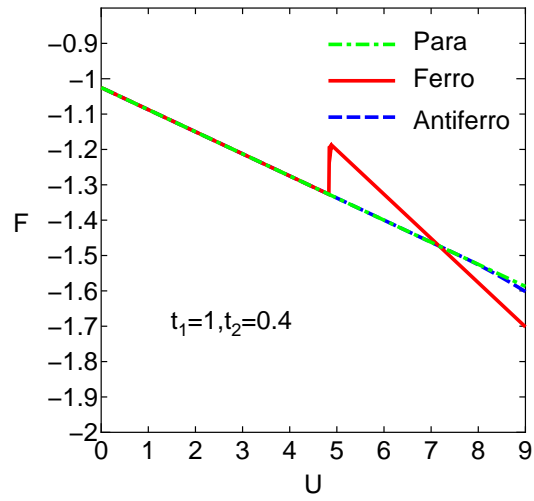


図 14:  $t_1 = 1, t_2 = 0.4$  の時の  $U - F$  図

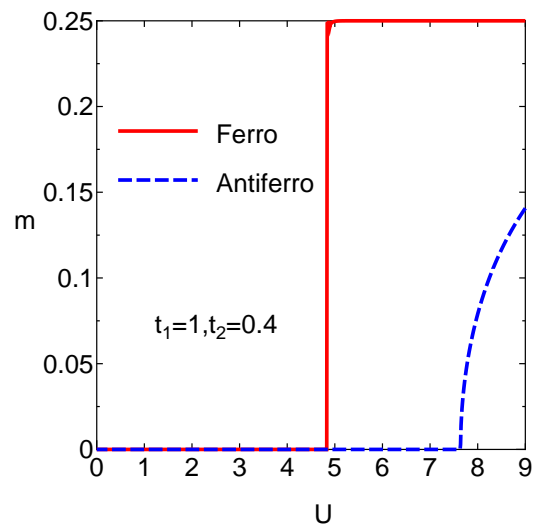


図 15:  $t_1 = 1, t_2 = 0.4$  の時の  $U - m$  図

### 3.2 磁気相図

各  $t_1, t_2$  における  $U - F$  図と  $U - m$  図から、磁気相図を決定すると、図 16 のようになる。図 16 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 は常磁性絶縁体を表し、実線は 1 次転移、点線は 2 次転移を表す。 $t_1 = 0.01, t_2 = 1$  における FI と AFI の相境界は、 $t_1 = 0.5 \sim 0.1$  の 5 点を 4 次の多項式で fitting することで決定した。また、図 17 は、図 16 の磁気相図の  $t_2/t_1 = 0.7 \sim 1$  における拡大図である。

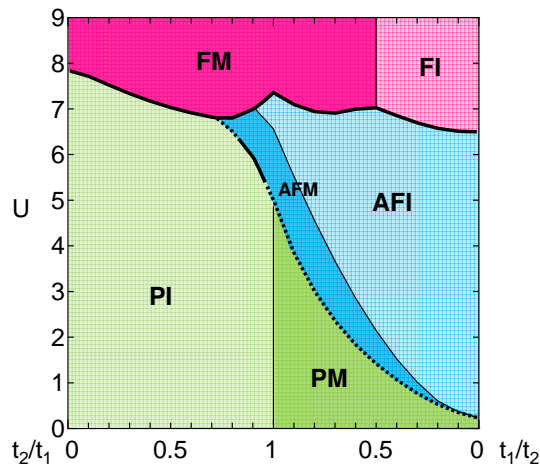


図 16: 磁気相図 実線は 1 次転移、点線は 2 次転移を表す

図 16 の磁気相図の  $t_2/t_1 < 1$  における PI と AFM の相境界は、1 次転移と 2 次転移のみを区別しているが、実際は図 17 のようになっている。図 17 において、実線は弱い 1 次転移（後に説明）、点線は 2 次転移を表す。まず、 $t_2/t_1 = 0.8$  において、PI と AFM の相境界付近の  $U - m$  図と、この  $U - m$  図の代表的な 3 点におけるバンド図を図 18 ~ 図 21 に示す。バンド図において、実線が上向きスピン、破線が下向きスピンを表す。図 18 ~ 図 24 の数値計算は、システムサイズ  $L^2 = 200 \times 200$ 、温度  $T = 0.01$  で行った。図 18 ~ 図 21 から、 $t_2/t_1 = 0.8$  では、 $U$  を上げるにつれて、 $U = 6.52$  で PI から AFI' に 2 次転移し、 $U = 6.56$  で AFI' から AFM に 1 次転移する。AFI' は反結合軌道の反強磁性絶縁体であるが、図 16 の AFI とは違う反結合軌道の反強磁性絶縁体である。次に、 $t_2/t_1 = 0.9$  において、PI と AFM の相境界付近の  $U - m$  図と、この  $U - m$  図の代表的な 2 点におけるバンド図を図 22 ~ 図 24 に示す。図 22 ~ 図 24 から、 $t_2/t_1 = 0.9$  では、 $U$  を上げるにつれて、 $U = 6.01$  で PI から AFM に 1 次転移する。これらの数値計算を  $t_2/t_1 = 0.70 \sim 0.99$  の領域で 0.01 刻みで行い、同様に調べて作った磁気相図が図 17 である。図 17 の左側の AFI' は閉じていないが、実際は図 16 から分かるように FM があるので、閉じている。図 17 の右側の AFI' が閉じていない理由は、本研究では分からなかった。ま

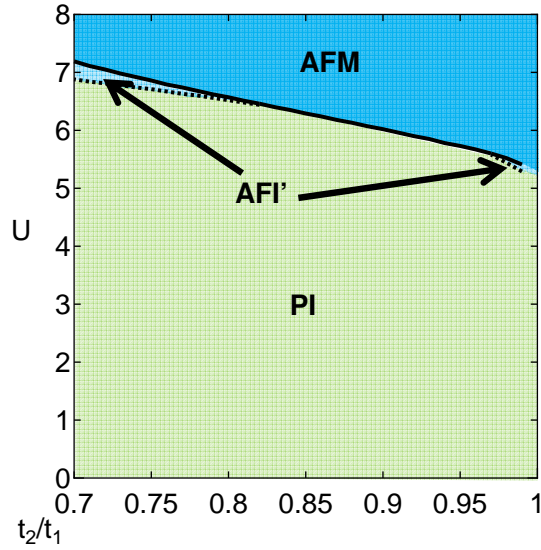


図 17: 図 16 の磁気相図の  $t_2/t_1 = 0.7 \sim 1$  における拡大図 実線は弱い 1 次転移、点線は 2 次転移を表す

た、図 17 の 1 次転移は、付録 A の  $U - F$  図が示すように、ヒステリシスがないという意味で、1 次転移とは断定できないが、図 18 ~ 図 24 が示すように、バンド構造のギャップの閉じ方が不連続であることや磁化にとびがあることから、1 次転移の特徴も見られる。そこで、本研究では図 17 の 1 次転移を弱い 1 次転移と呼ぶことにする。

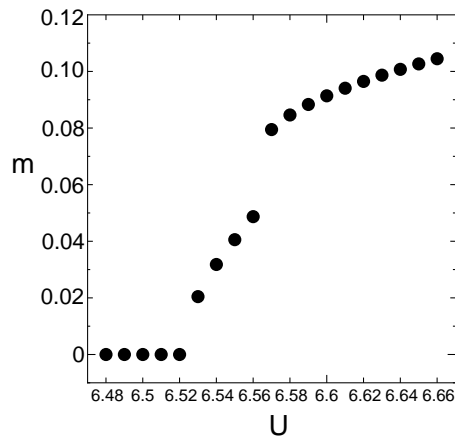


図 18:  $t_2/t_1 = 0.8$  における PI と AFM の相境界付近の  $U - m$  図

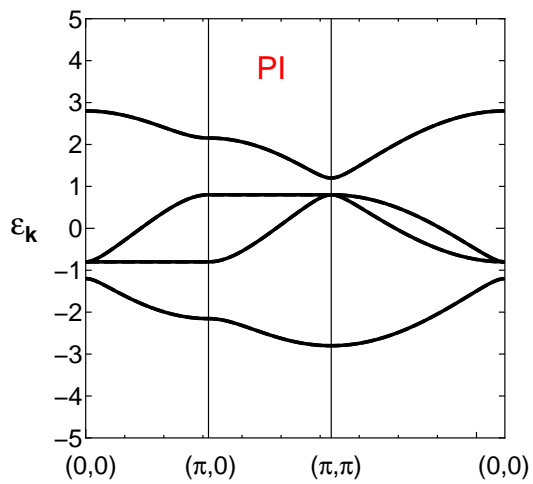


図 19:  $t_2/t_1 = 0.8$ ,  $U = 6.52$  におけるバンド図

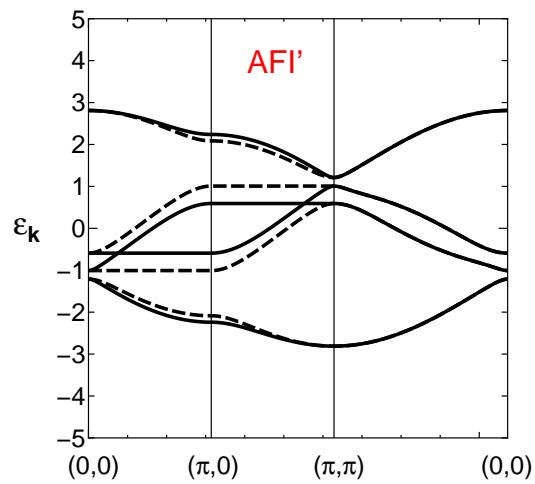


図 20:  $t_2/t_1 = 0.8$ ,  $U = 6.54$  におけるバンド図

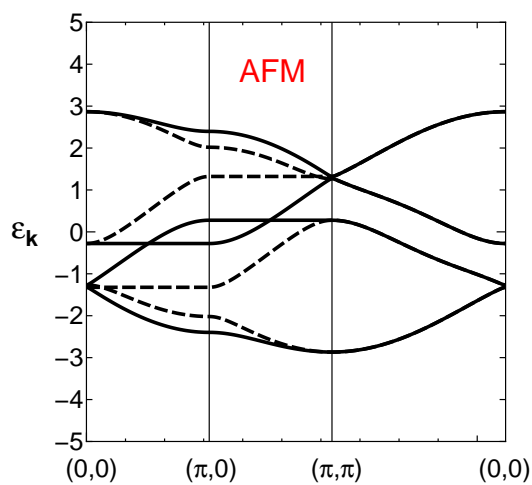


図 21:  $t_2/t_1 = 0.8$ ,  $U = 6.57$  におけるバンド図



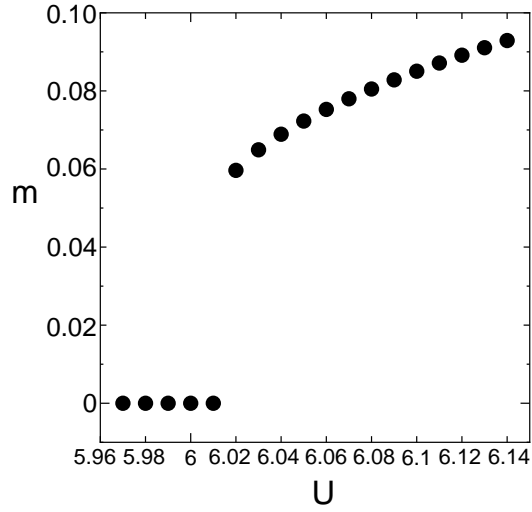


図 22:  $t_2/t_1 = 0.9$  における PI と AFM の相境界付近の  $U - m$  図

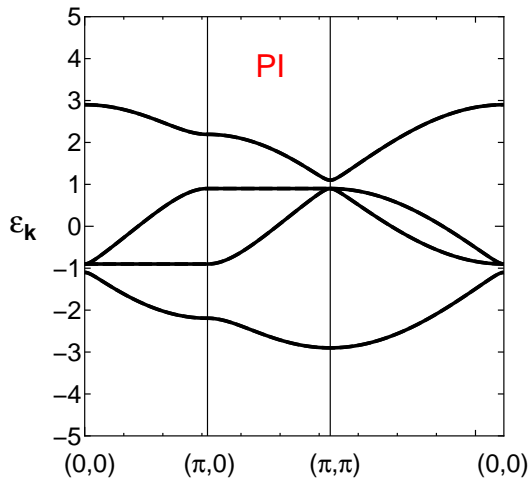


図 23:  $t_2/t_1 = 0.9$ ,  $U = 6.01$  におけるバンド図

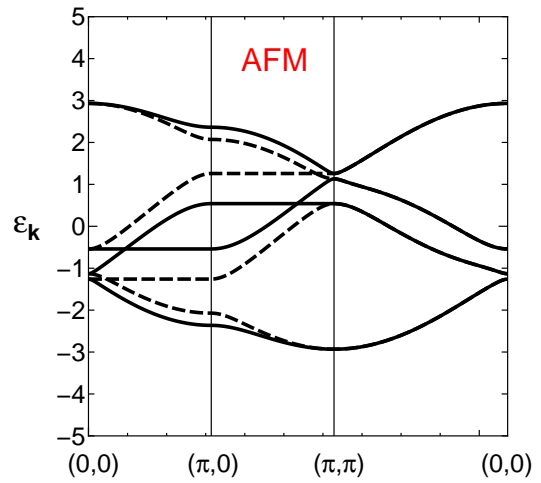


図 24:  $t_2/t_1 = 0.9$ ,  $U = 6.02$  におけるバンド図

### 3.3 反結合軌道の反強磁性と bipartite 格子の反強磁性

図 16 の相図では、bipartite 格子の反強磁性の領域はない。これは、bipartite 格子の反強磁性が全ての領域で、基底状態になることはないからである。それを示す 1 例として、 $t_1 = t_2 = 1$  における bipartite 格子の反強磁性も含めた  $U - F$  図と  $U - m$  図を図 25 に示す。

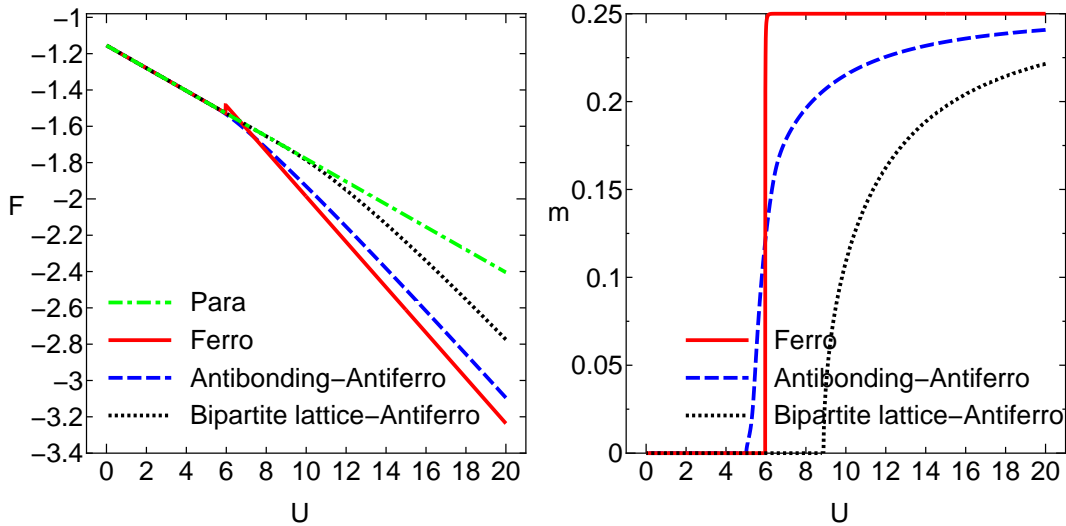


図 25:  $t_1 = t_2 = 1$  における bipartite 格子の反強磁性も含めた  $U - F$  図と  $U - m$  図

bipartite 格子の反強磁性が基底状態にならない理由は以下のように考えられる。図 16 の相図から、反強磁性が現れるとすると  $t_1 < t_2$  の領域である。反結合軌道の反強磁性を  $t_2$  が大きい極限で考えると、図 26 のようになっている。これは、 $n = 1/2$  で格子 2 個につき 1 個の電子が存在している quarter-filling において、 $t_2$  が大きい極限では、図 27 のように結合軌道と反結合軌道に分裂した反結合軌道にスピンの反平行に詰まっていることを表している。一方で、bipartite 格子の反強磁性の場合、どの格子にも平均して  $1/2$  個電子が反平行に詰まっている。それゆえ、bipartite 格子の反強磁性では、反結合軌道を形成する束縛エネルギー  $t_2$  の利得がない。従って、反結合軌道の反強磁性の方が bipartite 格子の反強磁性よりも常にエネルギーが低い。以下では、反結合軌道の反強磁性のことを単に反強磁性と呼ぶ。図 10 ~ 図 24 と付録 A でも、反結合軌道の反強磁性のことを反強磁性と表記している。

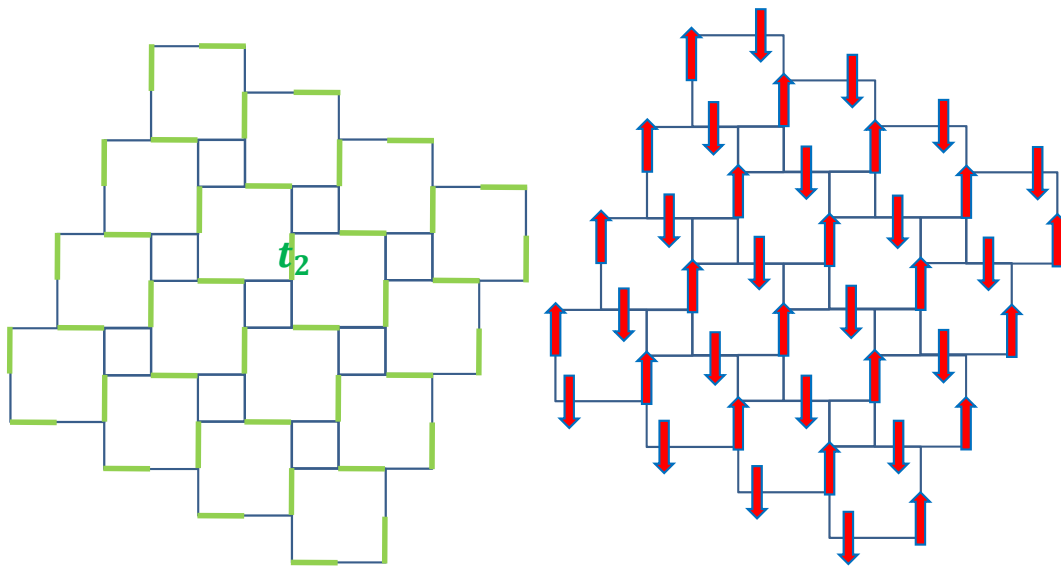
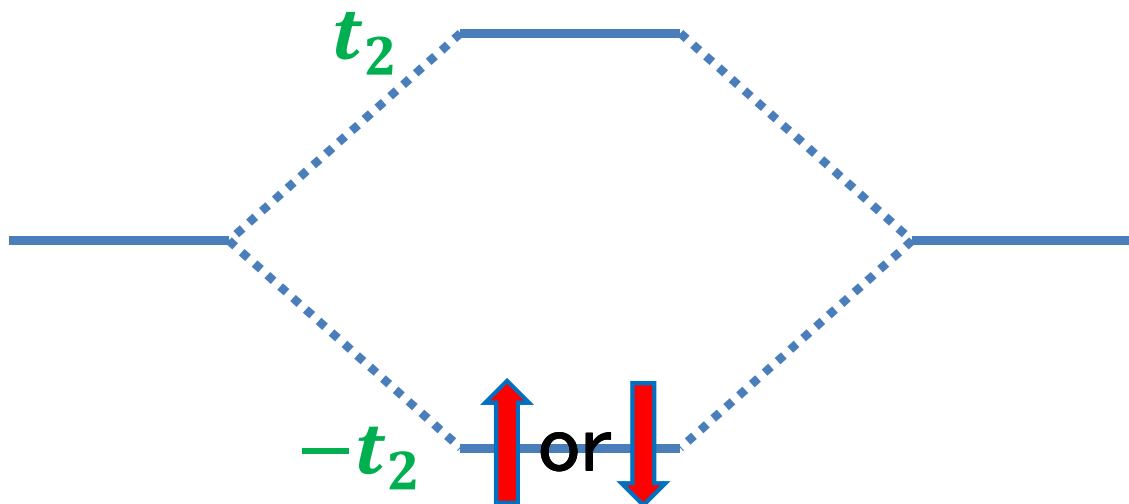


図 26: 左図は  $t_2$  が大きい極限の時の  $t_2$  ボンドを強調した模式図 右図は  $t_2$  ボンドでスピンの反強磁性を作っている模式図

## 結合軌道



## 反結合軌道

図 27:  $t_2$  が大きい極限の時の結合軌道と反結合軌道

### 3.4 金属絶縁体転移

#### 3.4.1 常磁性相の金属絶縁体転移

常磁性相内に金属絶縁体転移がある。この金属絶縁体転移は、 $t_1 = t_2 = 1$  を境に起こる。これを詳細に調べるために、システムサイズ  $L^2 = 200 \times 200$ 、温度  $T = 0.01$ 、 $U = 3$  におけるフェルミ面を調べた。その結果を図 28 ~ 図 33 に示す。赤の実線が上向きスピン、緑の点線が下向きスピンを表す。図 28 ~ 図 33 のフェルミ面から  $t_2/t_1$  が 1 に近づくとつれて、絶縁体から金属に転移していることが分かる。しかし、温度  $T = 0.01$  のフェルミ面では、 $t_1 = t_2 = 1$  を境に金属絶縁体転移が起こっているか分からない。そこで、温度  $T$  と  $(t_1, t_2)$  の組を変えた 4 つの場合で、フェルミ面を調べた。その結果を、図 34 ~ 図 37 に示す。 $t_2 = 0.95$  において、 $T = 0.03$  の時は図 34 から金属であり、 $T = 0.01$  の時は図 35 から絶縁体である。しかし、 $t_2 = 0.98$  においては、 $T = 0.01$  の時でさえも、図 36 から金属である。そこで、さらに  $t_2 = 0.98$  において、 $T = 0.001$  と低温にしてみると、図 37 が示すように絶縁体となった。このことから、常磁性相内の金属絶縁体転移は、 $t_1 = t_2 = 1$  で起こることが分かる。

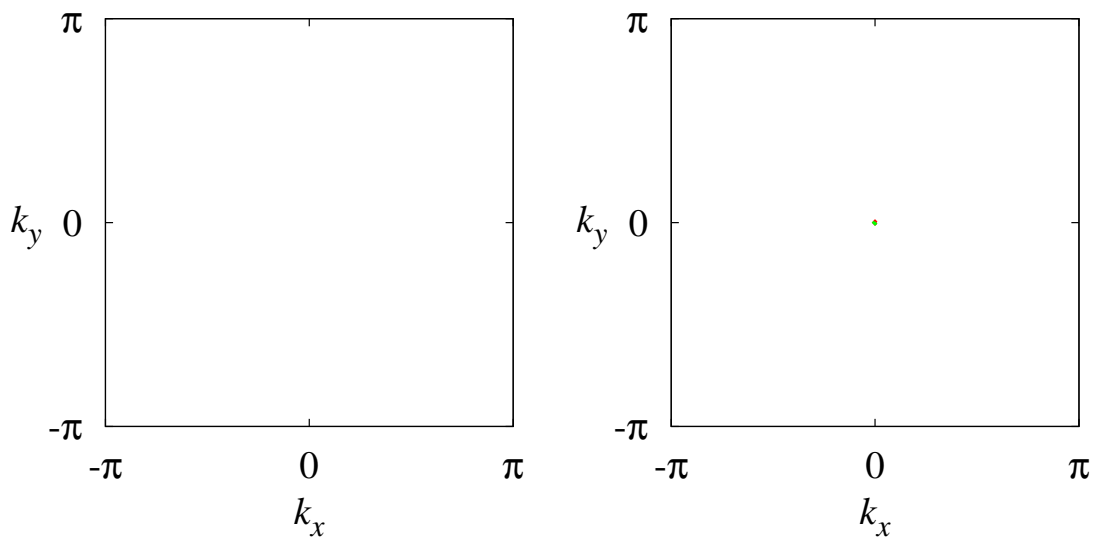


図 28:  $t_1 = 1, t_2 = 0.96, U = 3$  のフェルミ面  
図 29:  $t_1 = 1, t_2 = 0.97, U = 3$  のフェルミ面

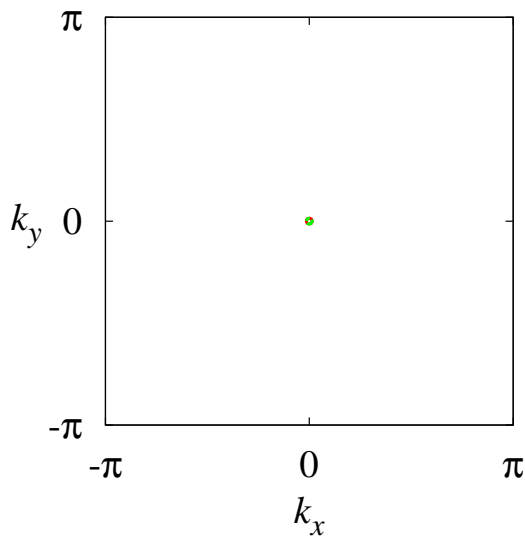


図 30:  $t_1 = 1, t_2 = 0.98, U = 3$  のフェルミ面

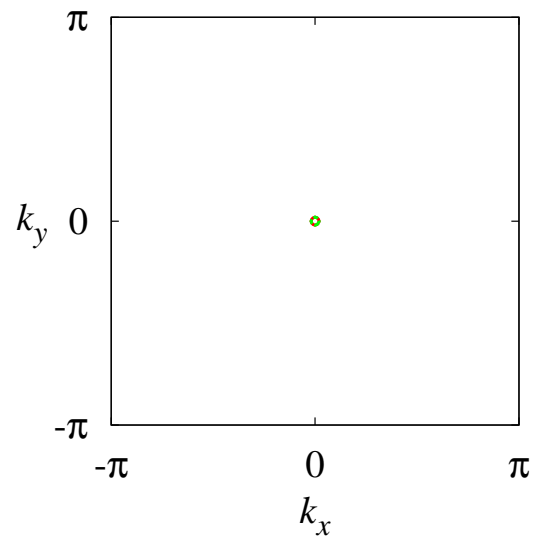


図 31:  $t_1 = 1, t_2 = 0.99, U = 3$  のフェルミ面

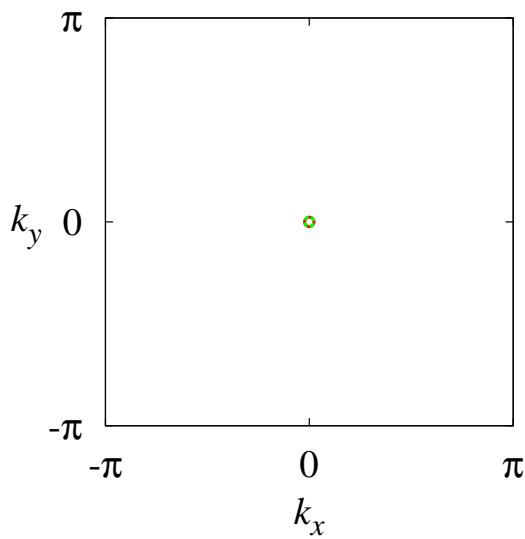


図 32:  $t_1 = t_2 = 1, U = 3$  のフェルミ面

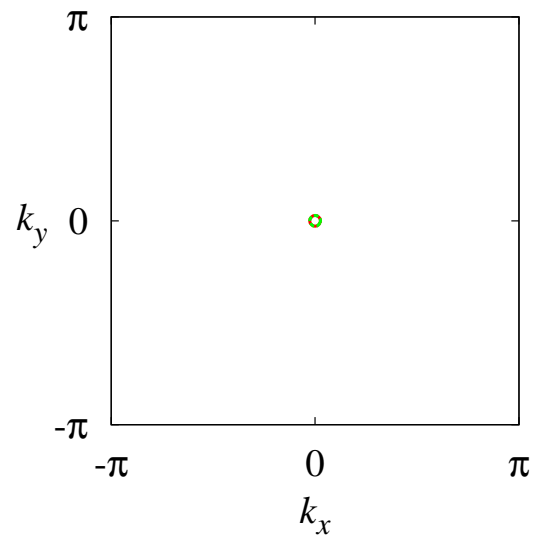


図 33:  $t_1 = 0.99, t_2 = 1, U = 3$  のフェルミ面

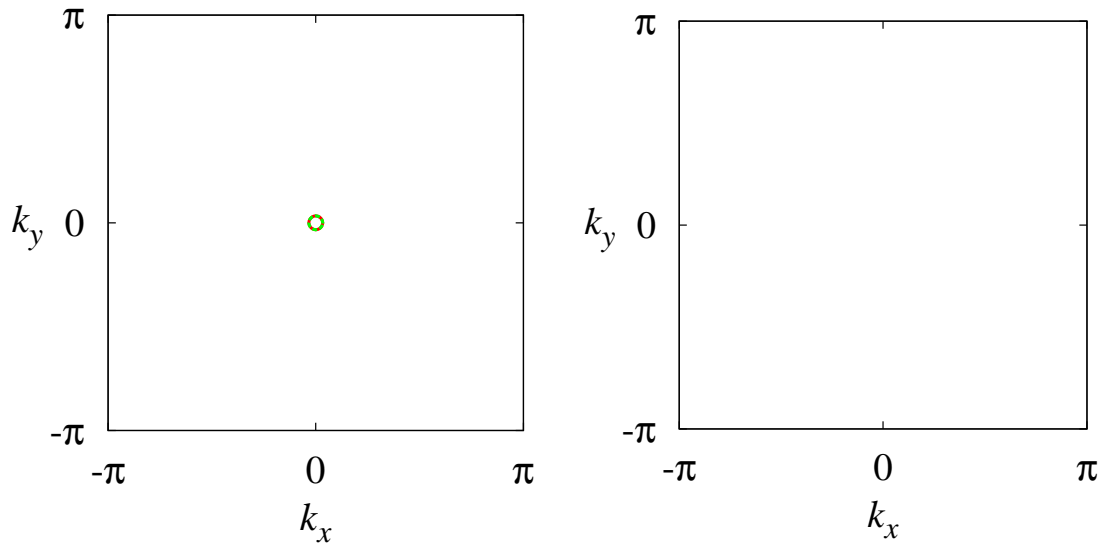


図 34:  $T = 0.03, t_1 = 1, t_2 = 0.95, U = 3$  のフェルミ面  
 図 35:  $T = 0.01, t_1 = 1, t_2 = 0.95, U = 3$  のフェルミ面

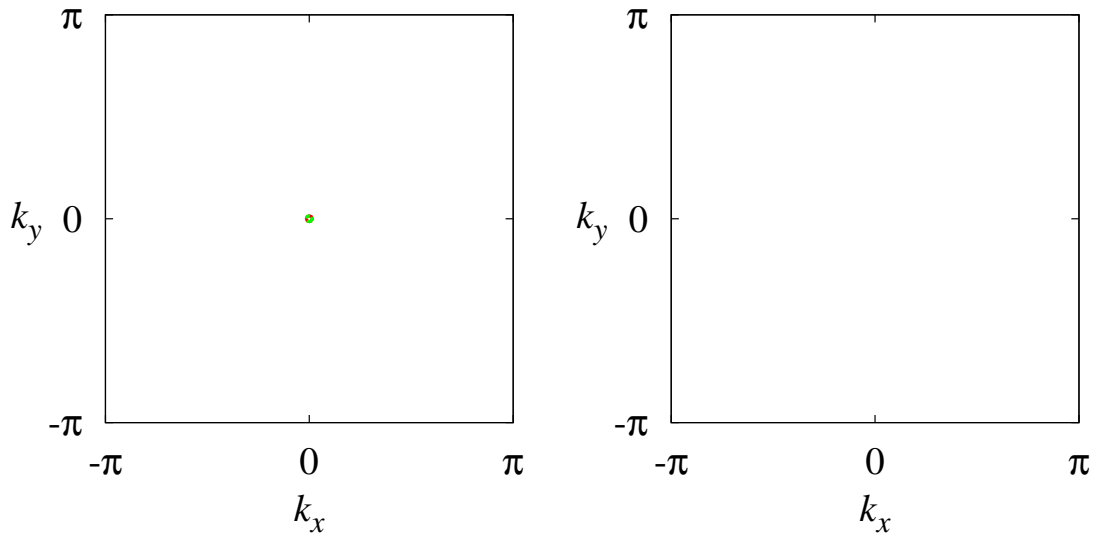


図 36:  $T = 0.01, t_1 = 1, t_2 = 0.98, U = 3$  のフェルミ面  
 図 37:  $T = 0.001, t_1 = 1, t_2 = 0.98, U = 3$  のフェルミ面

また、システムサイズ  $L^2 = 200 \times 200$ 、温度  $T = 0.01$ 、 $U = 3$  におけるバンド図を図 38 ~ 図 42 に示す。このバンド図から、常磁性相内の金属絶縁体転移は、Lifshitz 転移 [9] であることが分かる。Lifshitz 転移とは、フェルミ面のトポロジーが変わることを言う。本研究の場合、バンド図で Lifshitz 転移であるかを判断するには、バンド構造において、フェルミレベル近傍に位置するバンドが、フェルミレベルに接触するか、或いは離れるかを見れば良い。常磁性相内の金属絶縁体転移では、非等価な 2 つの跳び移り積分の比を変えることで、Lifshitz 転移が起こる。

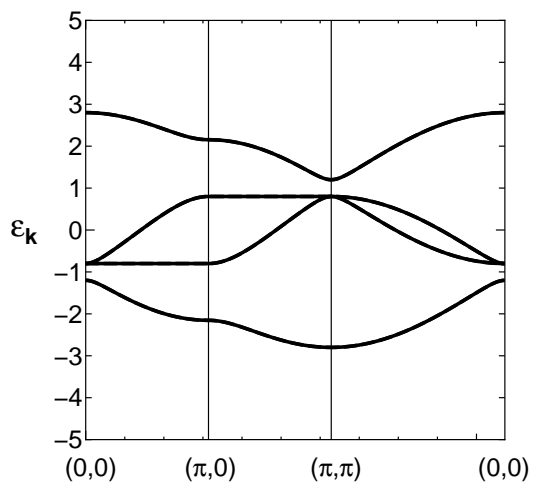


図 38:  $t_1 = 1, t_2 = 0.8, U = 3$  の時のバンド図

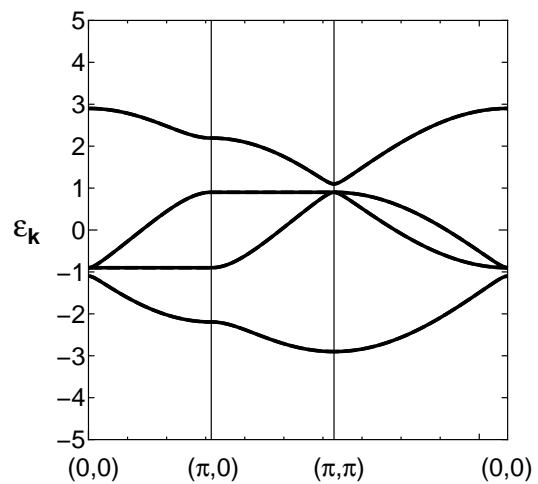


図 39:  $t_1 = 1, t_2 = 0.9, U = 3$  の時のバンド図

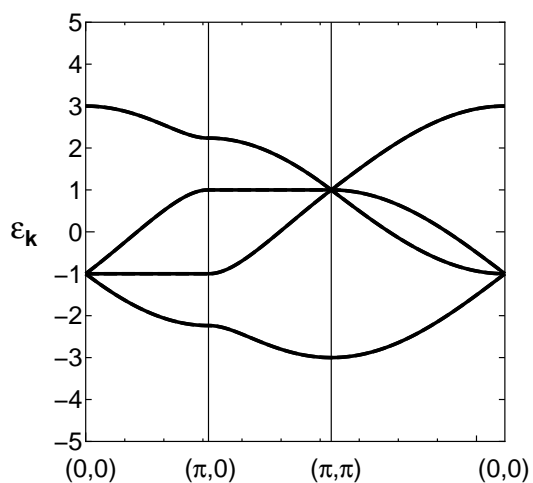


図 40:  $t_1 = t_2 = 1, U = 3$  の時のバンド図

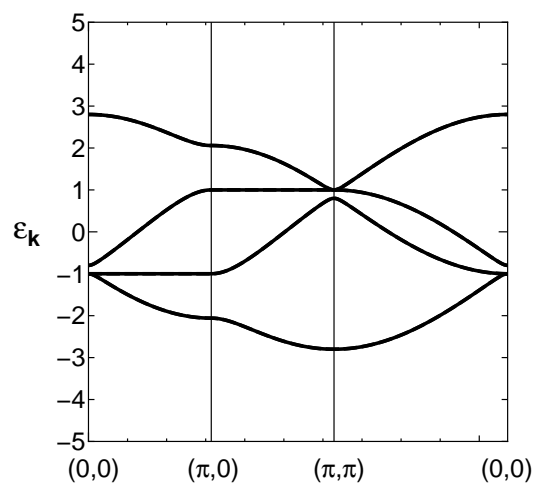


図 41:  $t_1 = 0.9, t_2 = 1, U = 3$  の時のバンド図

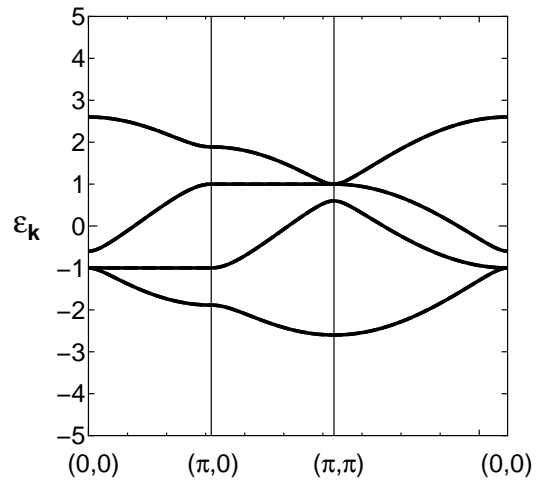


図 42:  $t_1 = 0.8, t_2 = 1, U = 3$  の時のバンド図



### 3.4.2 強磁性相の金属絶縁体転移

強磁性相内にも金属絶縁体転移がある。この金属絶縁体転移は、 $t_1 = 0.5$  を境に起こる。これを詳細に調べるために、システムサイズ  $L^2 = 200 \times 200$ 、温度  $T = 0.01$ 、 $U = 8$  におけるフェルミ面とバンド図を調べた。その結果を図 43 ~ 図 50 に示す。バンド図において、実線が上向きスピン、破線が下向きスピンを表す。また、化学ポテンシャル  $\mu$  は、図で示した全ての領域で  $\mu = -2$  である。図 43 ~ 図 47 のフェルミ面から、強磁性相内の金属絶縁体転移は、 $t_1 = 0.5$  で起こることが分かる。また、図 43 ~ 図 50 のフェルミ面とバンド図を見ると、この金属絶縁体転移は、 $t_1$  を 0.45 から 0.55 に上げるにつれて、 $\mu = -2$  にあるフェルミエネルギーに、 $(0, 0)$  と  $(\pi, \pi)$  でバンドが接触することで起こっていることが分かる。このことから、強磁性相内の金属絶縁体転移は、Lifshitz 転移であることが分かる。この Lifshitz 転移は、非等価な 2 つの跳び移り積分の比を変えることで起こる。

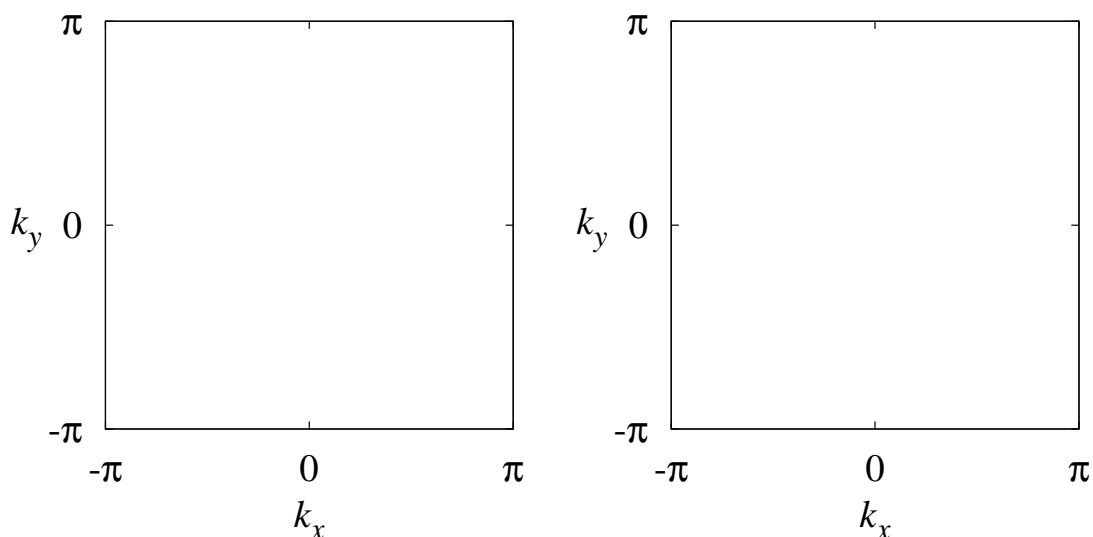


図 43:  $t_1 = 0.45, t_2 = 1, U = 8$  のフェルミ面  
 図 44:  $t_1 = 0.49, t_2 = 1, U = 8$  のフェルミ面

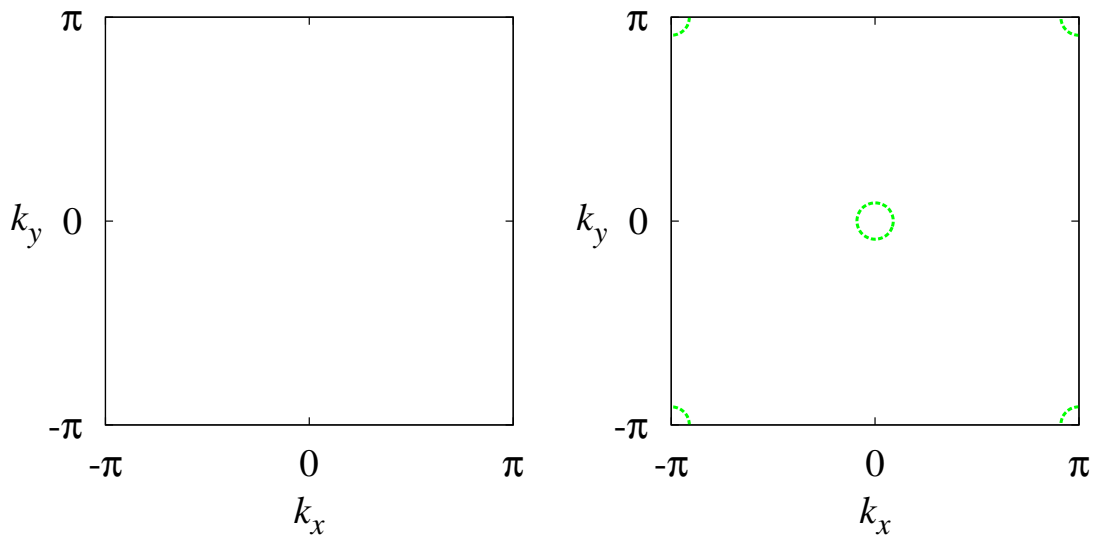


図 45:  $t_1 = 0.50, t_2 = 1, U = 8$  のフェルミ面  
 図 46:  $t_1 = 0.51, t_2 = 1, U = 8$  のフェルミ面

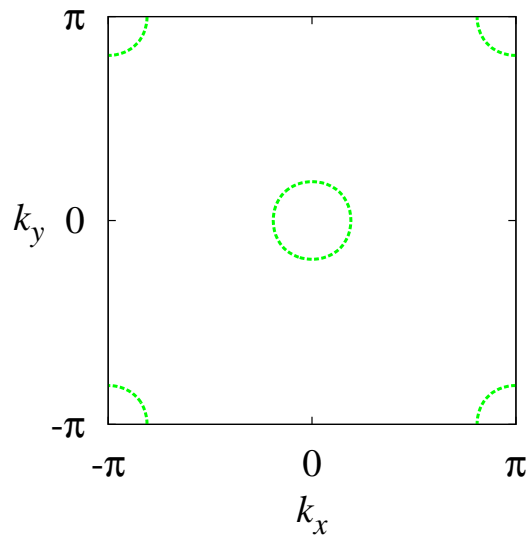
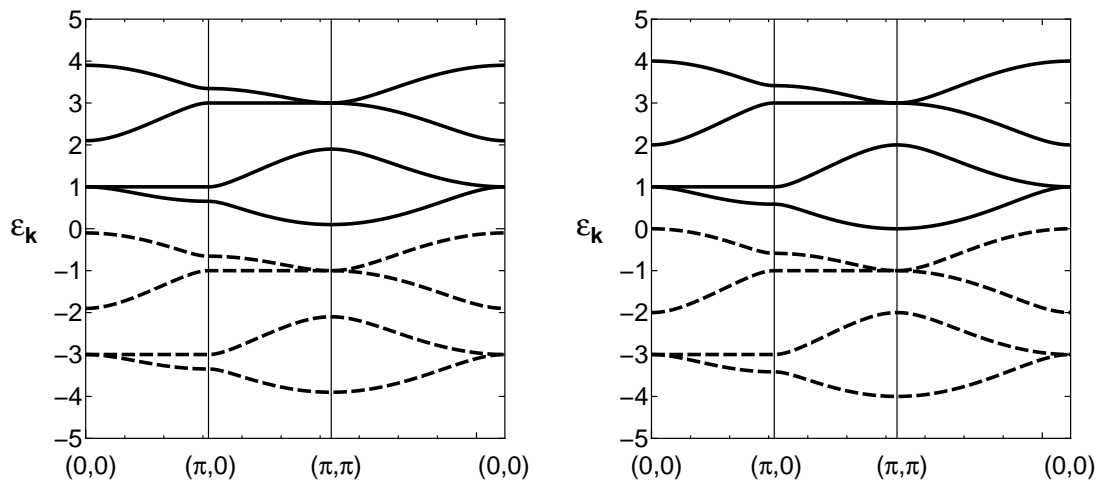
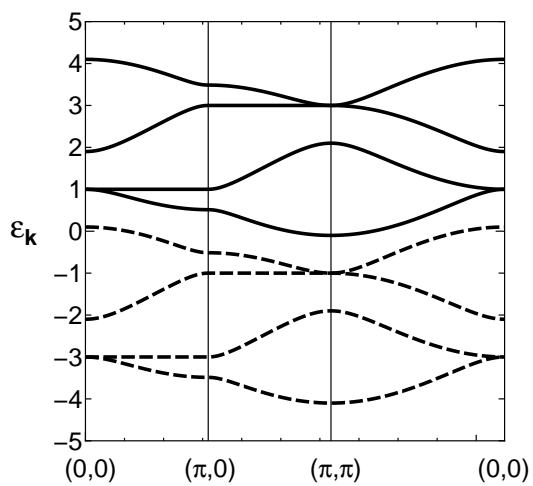


図 47:  $t_1 = 0.55, t_2 = 1, U = 8$  のフェルミ面



48:  $t_1 = 0.45, t_2 = 1, U = 8$  のバンド  

 49:  $t_1 = 0.50, t_2 = 1, U = 8$  のバンド



50:  $t_1 = 0.55, t_2 = 1, U = 8$  のバンド

### 3.4.3 反強磁性相の金属絶縁体転移

この節では、反強磁性相内の金属絶縁体転移について議論する。これを詳細に調べるために、システムサイズ  $L^2 = 200 \times 200$ 、温度  $T = 0.01$ 、 $U = 2.145$  におけるフェルミ面とバンド図を調べた。その結果を図 51 ~ 図 62 に示す。 $U = 2.145$  を選んだ理由は、そこが  $t_1 = 0.5$  における AFM と AFI の転移点であるからである。しかし、図 51 ~ 図 56 のフェルミ面を見ると、 $t_1 = 0.5$  で金属絶縁体転移が起こっていない。これは、 $t_1 = 0.5$  に固定して  $U$  を 0.01 刻みで下げて数値計算した際に同時に出力したバンド図を見て、AFM か AFI かの判定を行っており、精度が 0.01 しかないためである。それゆえ、反強磁性相内の金属絶縁体転移点は、中間値を採用している。だから、金属絶縁体転移が起こる  $t_1$  の値に誤差がある。図 57 ~ 図 62 のバンド図を見ると、反強磁性相内の金属絶縁体転移は、 $t_1$  を 0.45 から 0.58 に上げるにつれて、フェルミエネルギー近くにある上下のバンドが  $(\pi, 0)$  で接触し交わり、交わった交点が  $(0, 0)$  に向かっていくという過程を経て、起こっているということが分かる。このことから、反強磁性相内の金属絶縁体転移は、Lifshitz 転移であることが分かる。この Lifshitz 転移は、非等価な 2 つの跳び移り積分の比と  $U$  を変えることで起こる。また、反強磁性は図 7 を見ても分かるように、4 回対称を破っている。このことは、図 51 ~ 図 56 のフェルミ面を見ても分かる。実際、図 57 ~ 図 62 のバンド図は、 $(0, 0) \rightarrow (\pi, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$  の範囲では、上向きスピンの下向きスピンのように分裂している。4 回対称が破れていることを、バンド図で確認するために、 $t_1 = 0.55$  におけるバンド図を、 $(0, 0) \rightarrow (\pi, 0) \rightarrow (\pi, \pi) \rightarrow (0, 0)$  と  $(0, 0) \rightarrow (0, \pi) \rightarrow (\pi, \pi) \rightarrow (0, 0)$  の 2 つの経路で書いたバンド図を図 63、図 64 に示す。図 63 と図 64 とでは、上向きスピンと下向きスピンの入れ替わっていることが分かる。

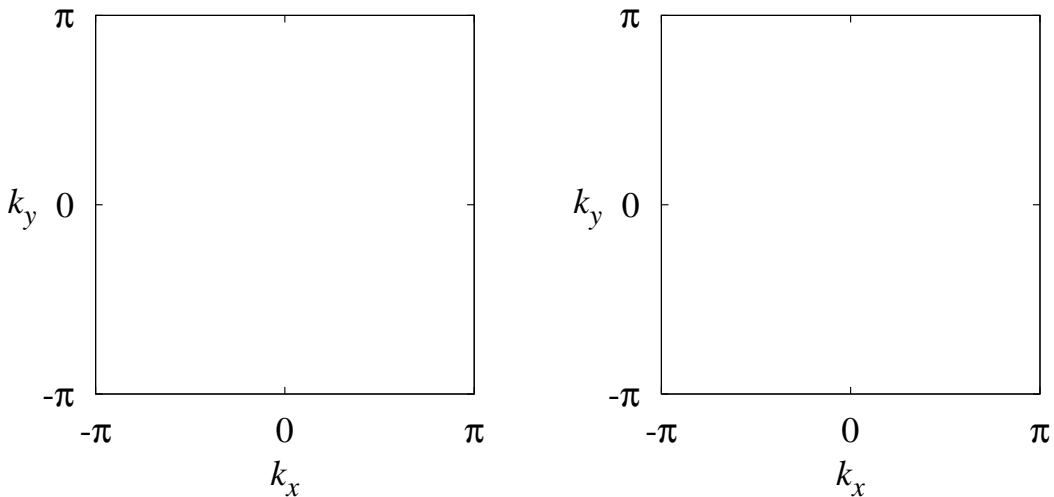


図 51:  $t_1 = 0.45, t_2 = 1, U = 2.145$  のフェルミ面  
 図 52:  $t_1 = 0.50, t_2 = 1, U = 2.145$  のフェルミ面

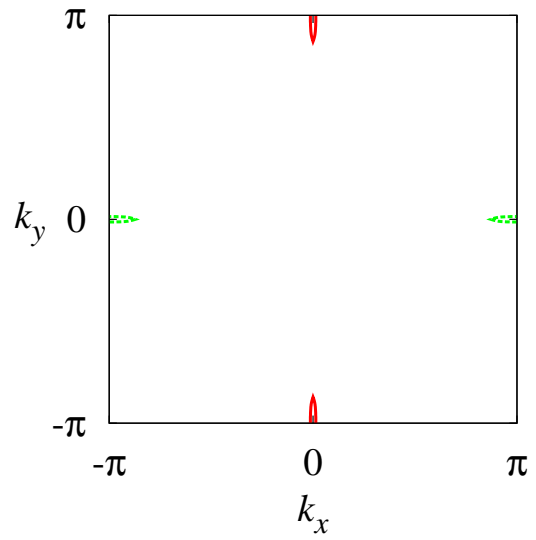
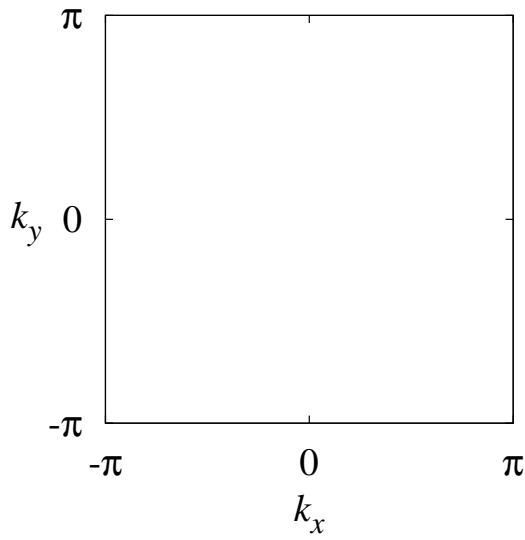


図 53:  $t_1 = 0.51, t_2 = 1, U = 2.145$  のフェルミ面  
 図 54:  $t_1 = 0.52, t_2 = 1, U = 2.145$  のフェルミ面

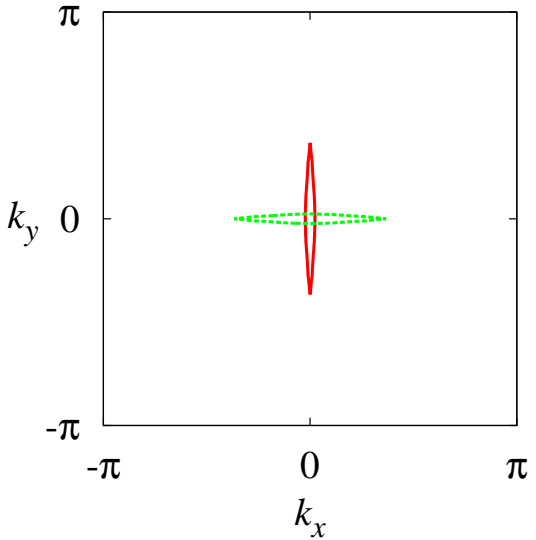
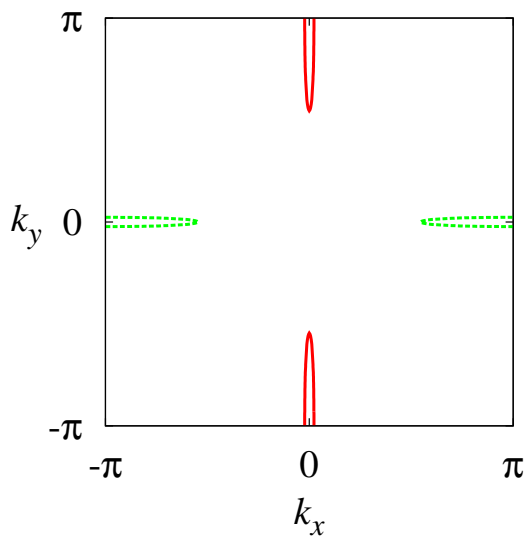


図 55:  $t_1 = 0.55, t_2 = 1, U = 2.145$  のフェルミ面  
 図 56:  $t_1 = 0.58, t_2 = 1, U = 2.145$  のフェルミ面

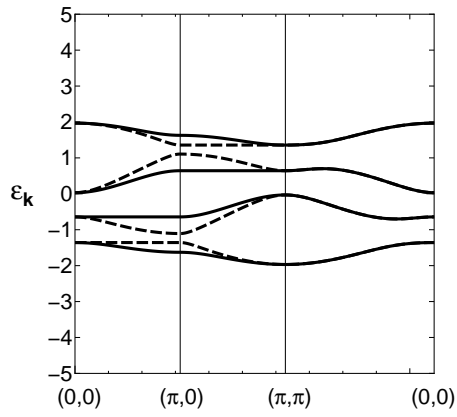


図 57:  $t_1 = 0.45, t_2 = 1, U = 2.145$  のバンド図

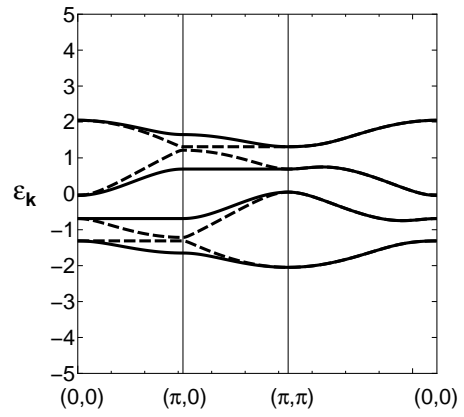


図 58:  $t_1 = 0.50, t_2 = 1, U = 2.145$  のバンド図

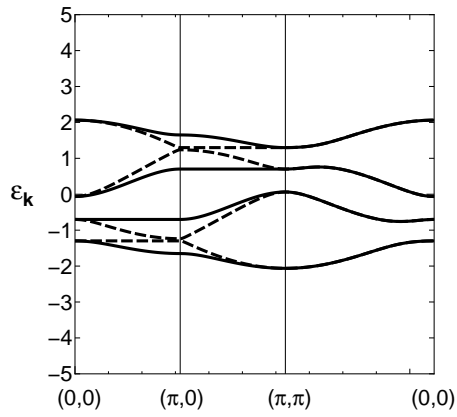


図 59:  $t_1 = 0.51, t_2 = 1, U = 2.145$  のバンド図

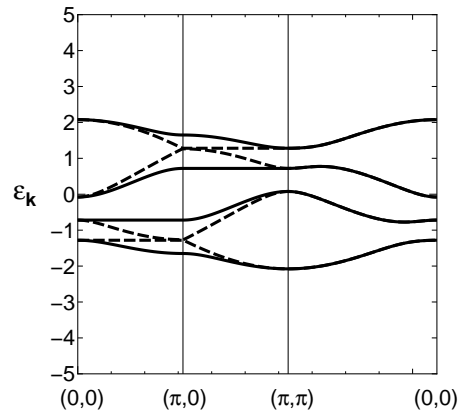


図 60:  $t_1 = 0.52, t_2 = 1, U = 2.145$  のバンド図

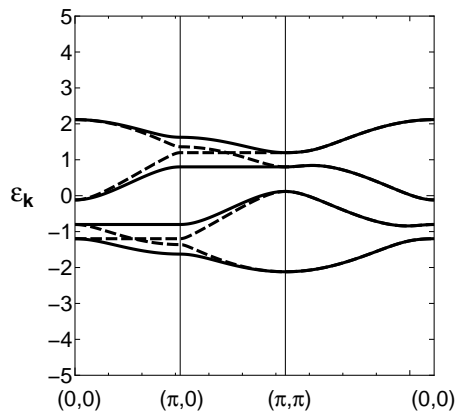


図 61:  $t_1 = 0.55, t_2 = 1, U = 2.145$  のバンド図

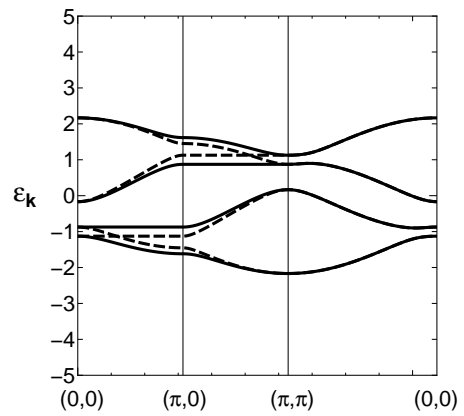


図 62:  $t_1 = 0.58, t_2 = 1, U = 2.145$  のバンド図

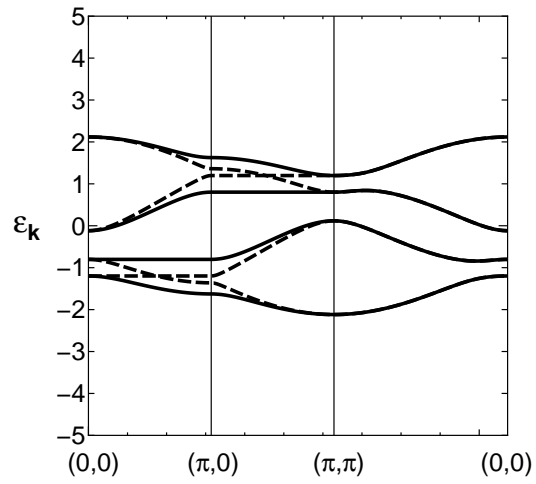


図 63:  $t_1 = 0.55$  における  $(0, 0) \rightarrow (\pi, 0) \rightarrow (\pi, \pi) \rightarrow (0, 0)$  の経路のバンド図

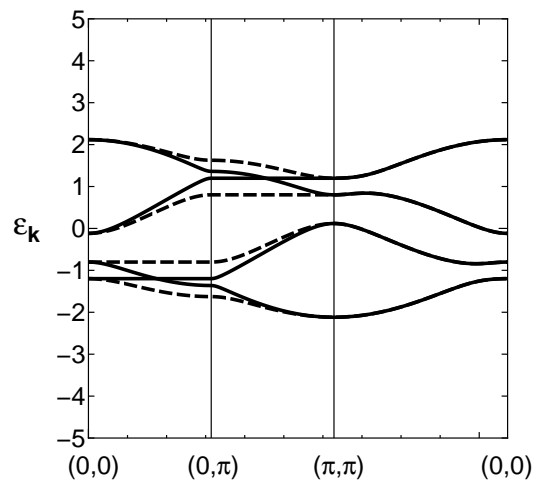


図 64:  $t_1 = 0.55$  における  $(0, 0) \rightarrow (0, \pi) \rightarrow (\pi, \pi) \rightarrow (0, 0)$  の経路のバンド図

## 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。これにより、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の範囲でしか調べられていなかったこの格子模型における磁気秩序が、一般的な遍歴電子モデルであるハバードモデルの quarter-filling において明らかになった。本研究のモデルは、常磁性相と強磁性相と反強磁性相の 3 つの相があり、 $U$  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。また、強磁性は全て完全強磁性である。 $t_1/t_2$  が大きくなるにつれて、強磁性が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、強磁性と反強磁性とのエネルギー差は小さくなっていく。常磁性相、強磁性相、反強磁性相の 3 つの相内で金属絶縁体転移がある。全ての相内で金属絶縁体転移を示すのは、珍しく大変興味深い。また、この 3 つの金属絶縁体転移は全て Lifshitz 転移である。

今後の課題として、5 つの事が挙げられる。1 つ目は、ハートリー-フォック近似の範囲で安定である強磁性が、電子相関をより厳密に考慮した場合に、安定であるかという問題である。というのも、本研究のハートリー-フォック近似において、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。このことは、電子相関をより厳密に扱った場合に、強磁性のエネルギーは下がらないが、反強磁性のエネルギーは下がり得ることを意味する。つまり、強磁性の安定領域は、電子相関を取り入れると、小さくなる可能性がある。2 つ目は、磁気相図内の AFI と AFY の物理的違いを明らかにすることである。PI と AFY は 2 次転移を境界としているが、PI と AFI との境界には、1 次転移がある。従って、PI と AFY は連続的につながった絶縁体であるが、PI と AFI は物理的に違う絶縁体である可能性がある。3 つ目は、Lifshitz 転移を 1 電子状態から解析し、金属絶縁体転移の物理的性質を明らかにすることである。4 つ目は、 $U$  が大きい領域で  $t_1 \ll t_2$  の極限の時、摂動論を用いて真の基底状態は何かを明らかにすることである。本研究の数値計算の範囲では、この領域で強磁性と反強磁性が完全に縮退している。5 つ目の問題として、図 17 の右側の AFY が閉じていない理由を明らかにすることがある。



# 付録

## A 各 $t_1, t_2$ における $U - F$ 図と $U - m$ 図の数値計算結果

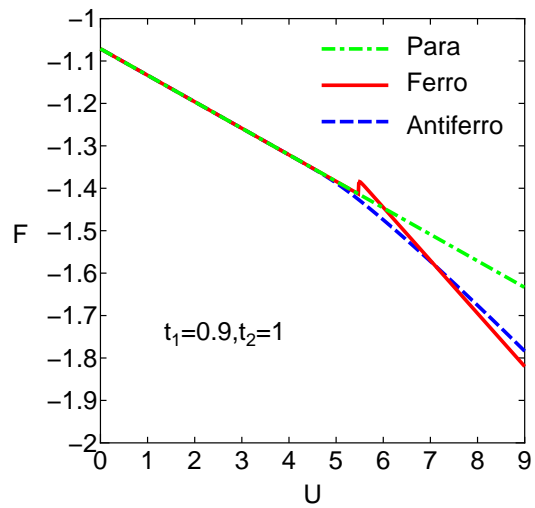


図 65:  $t_1 = 0.9, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

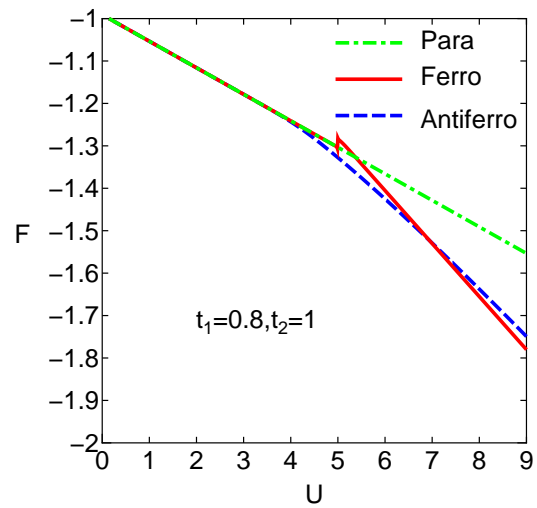


図 66:  $t_1 = 0.8, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

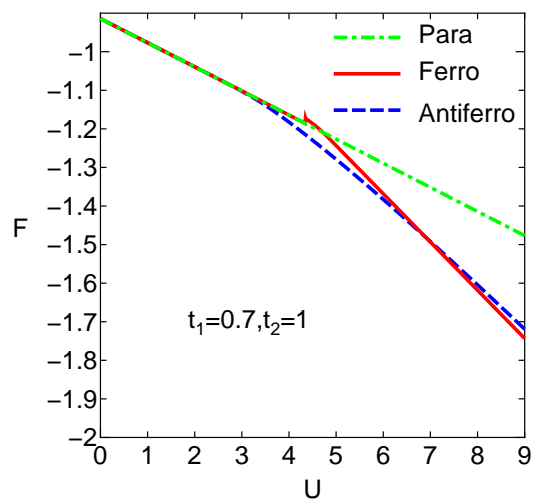


図 67:  $t_1 = 0.7, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

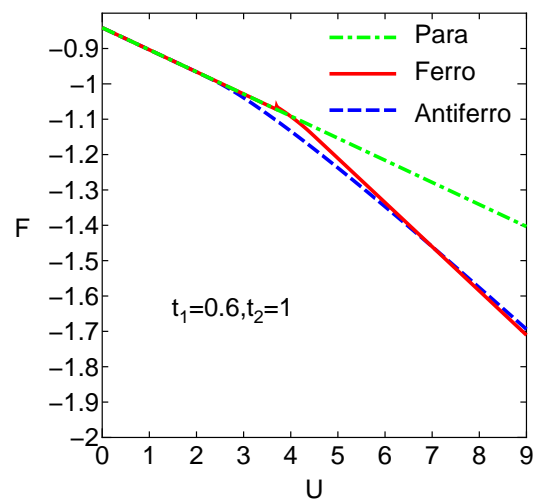


図 68:  $t_1 = 0.6, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

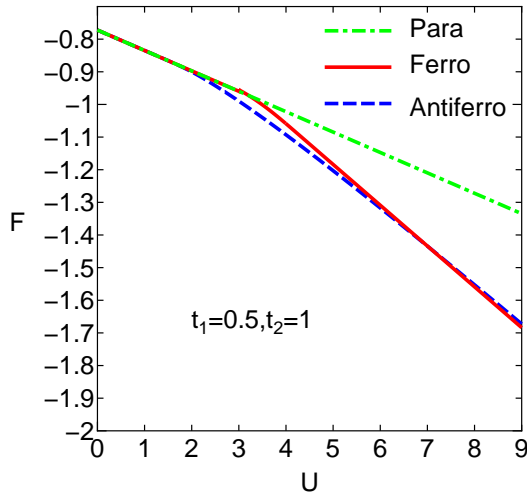


図 69:  $t_1 = 0.5, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

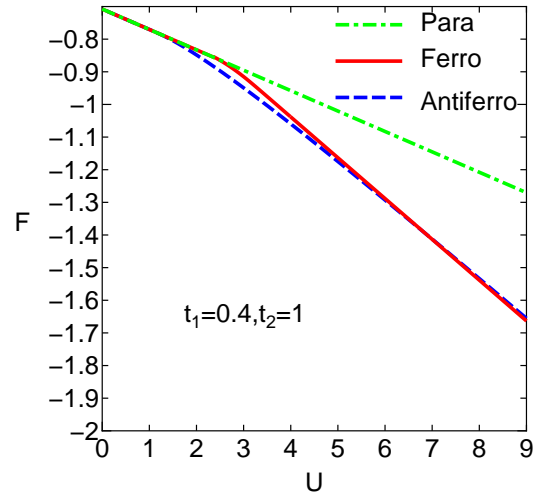


図 70:  $t_1 = 0.4, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

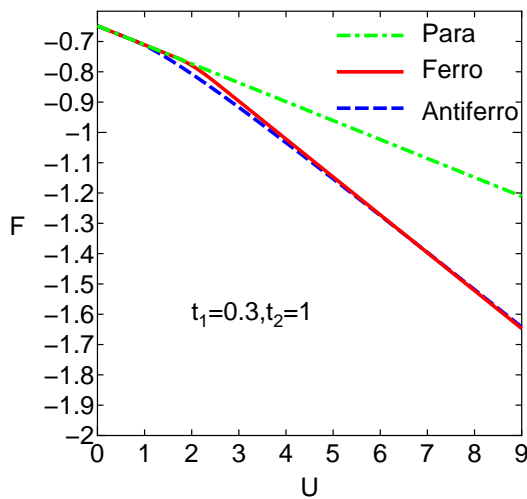


図 71:  $t_1 = 0.3, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

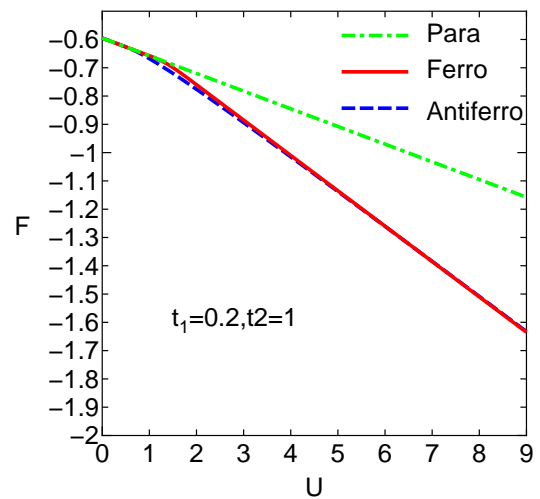


図 72:  $t_1 = 0.2, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

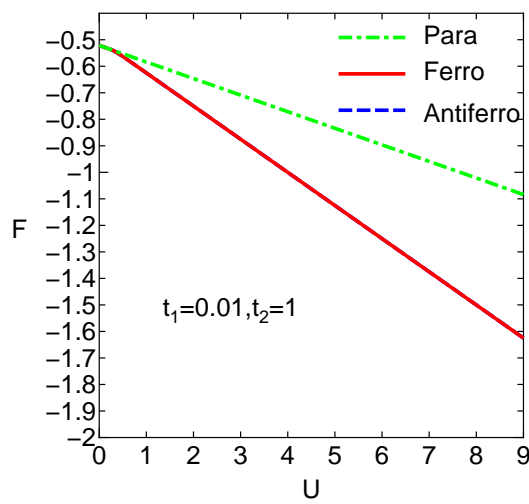
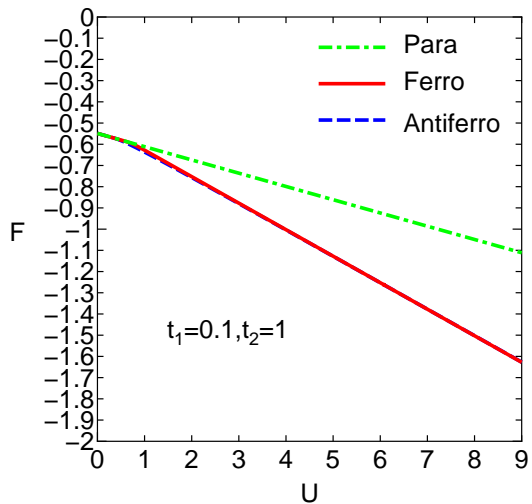


図 73:  $t_1 = 0.1, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図      図 74:  $t_1 = 0.01, t_2 = 1$  の時の  $U - F$  図

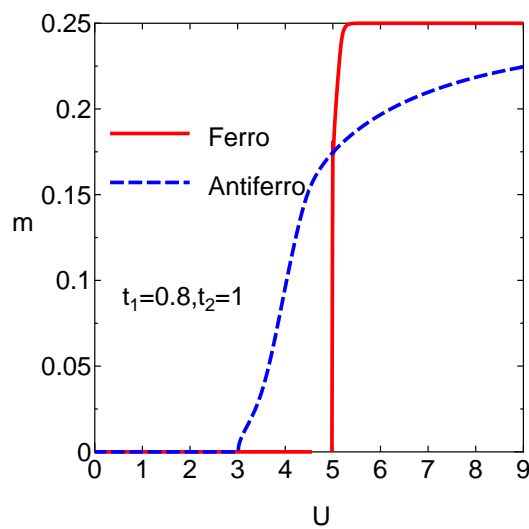
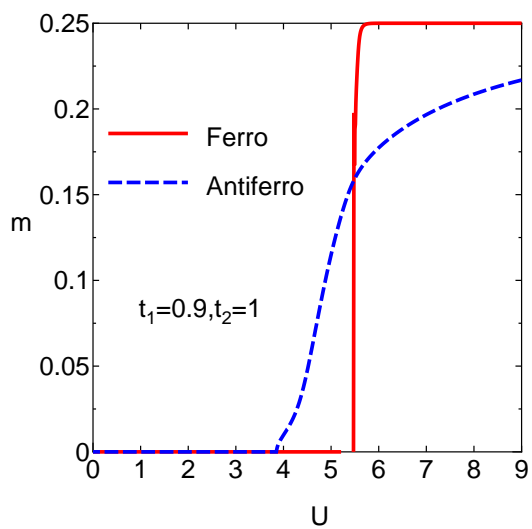


図 75:  $t_1 = 0.9, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図      図 76:  $t_1 = 0.8, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

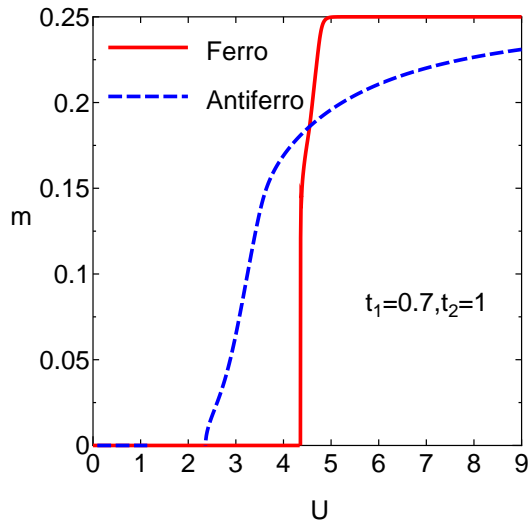


図 77:  $t_1 = 0.7, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

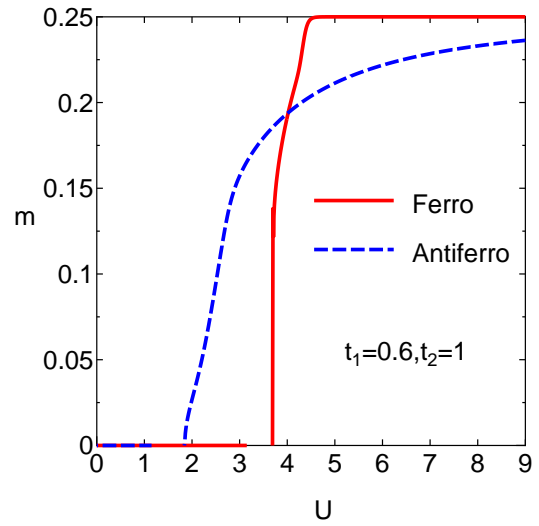


図 78:  $t_1 = 0.6, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

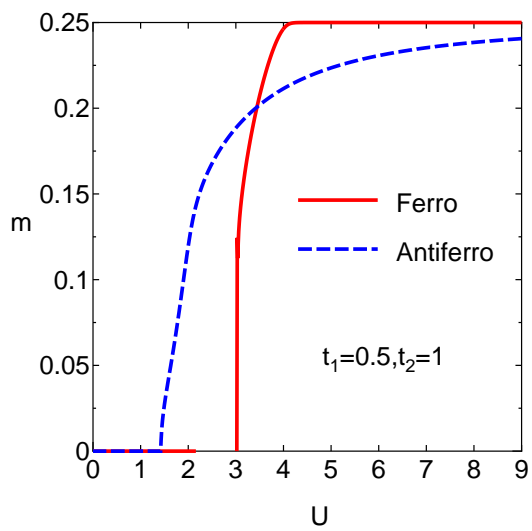


図 79:  $t_1 = 0.5, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

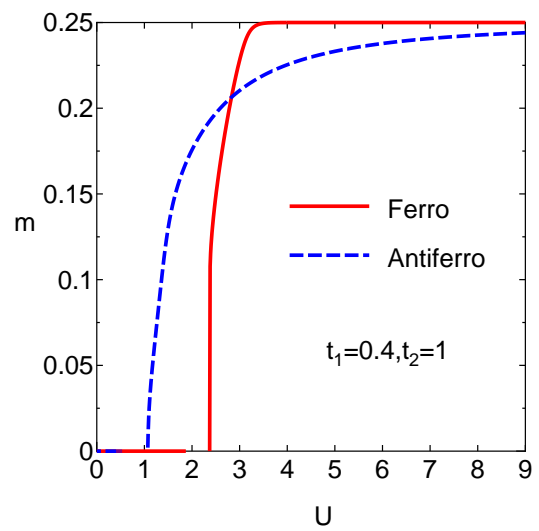


図 80:  $t_1 = 0.4, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

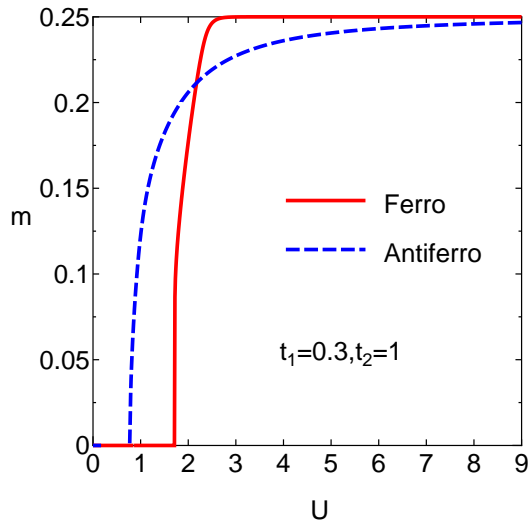


図 81:  $t_1 = 0.3, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

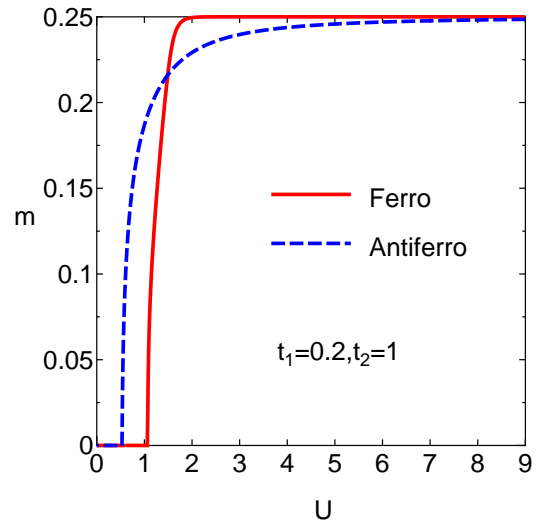


図 82:  $t_1 = 0.2, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

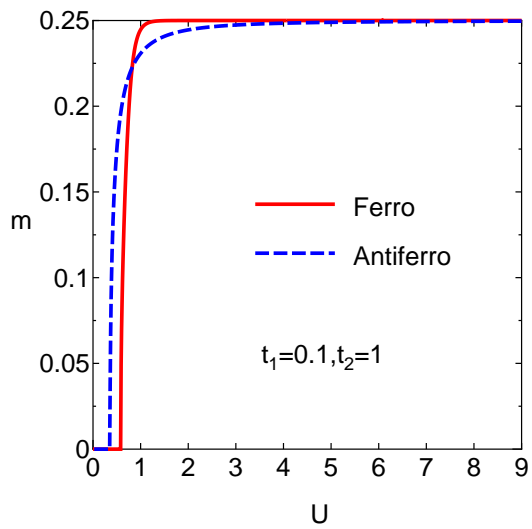


図 83:  $t_1 = 0.1, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

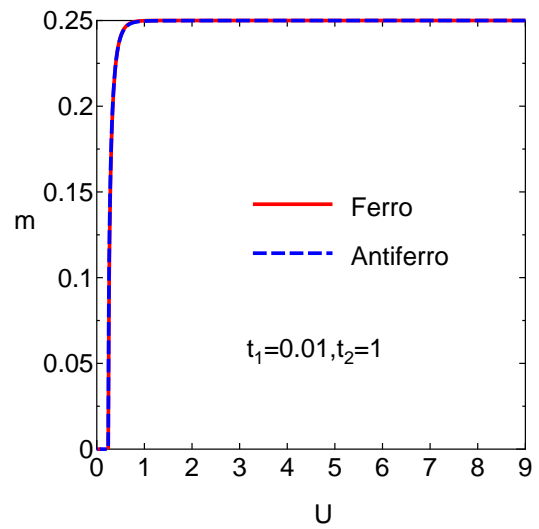


図 84:  $t_1 = 0.01, t_2 = 1$  の時の  $U - m$  図

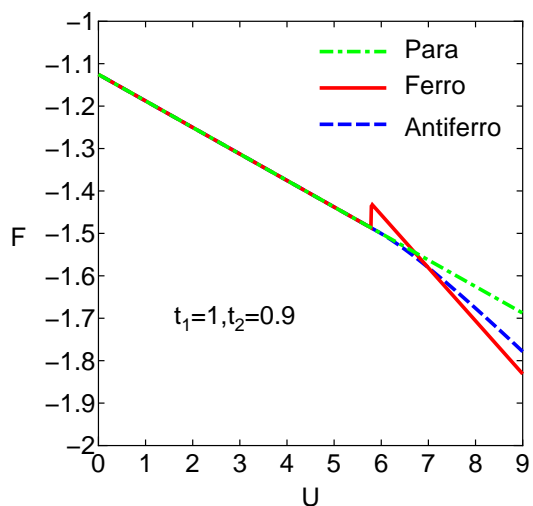


図 85:  $t_1 = 1, t_2 = 0.9$  の時の  $U - F$  図

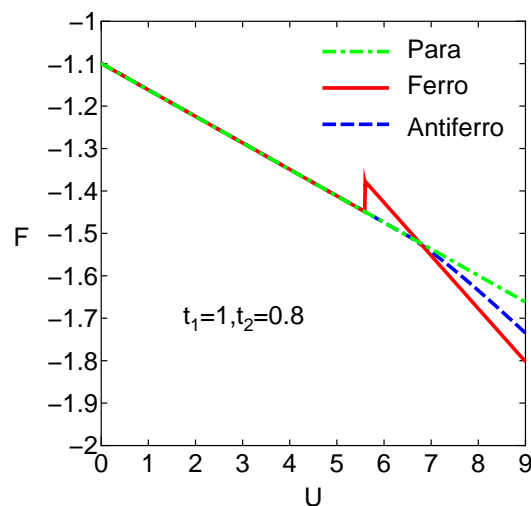


図 86:  $t_1 = 1, t_2 = 0.8$  の時の  $U - F$  図

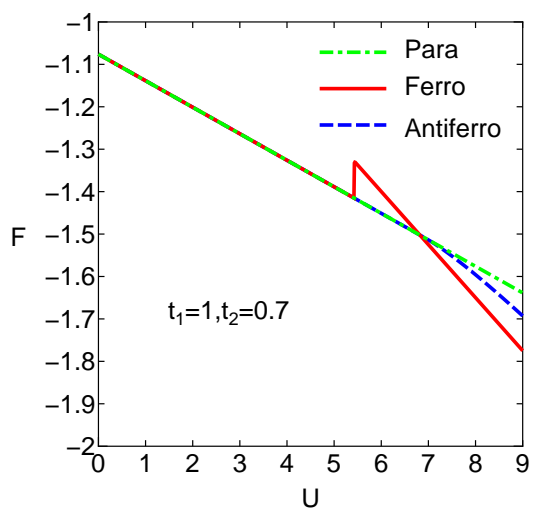


図 87:  $t_1 = 1, t_2 = 0.7$  の時の  $U - F$  図

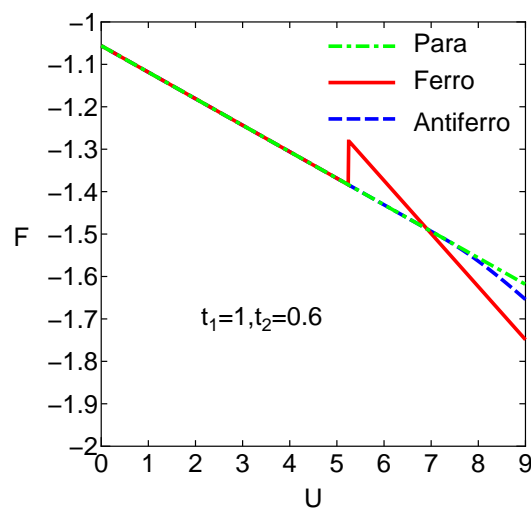


図 88:  $t_1 = 1, t_2 = 0.6$  の時の  $U - F$  図

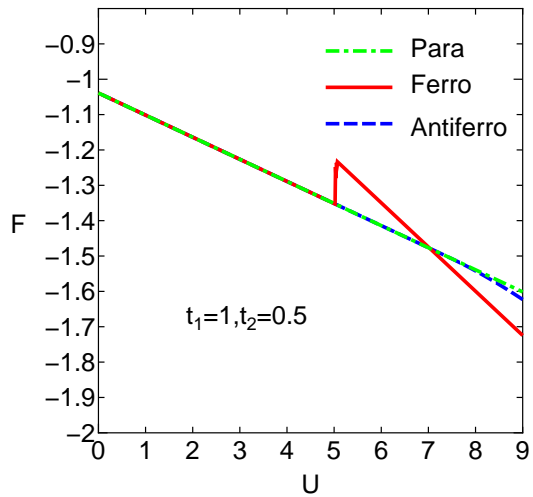


図 89:  $t_1 = 1, t_2 = 0.5$  の時の  $U - F$  図

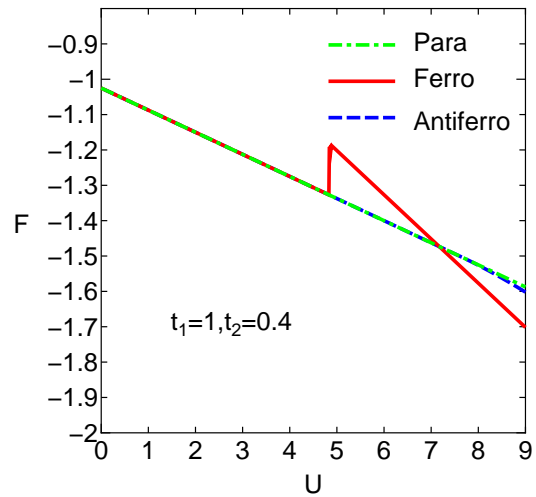


図 90:  $t_1 = 1, t_2 = 0.4$  の時の  $U - F$  図

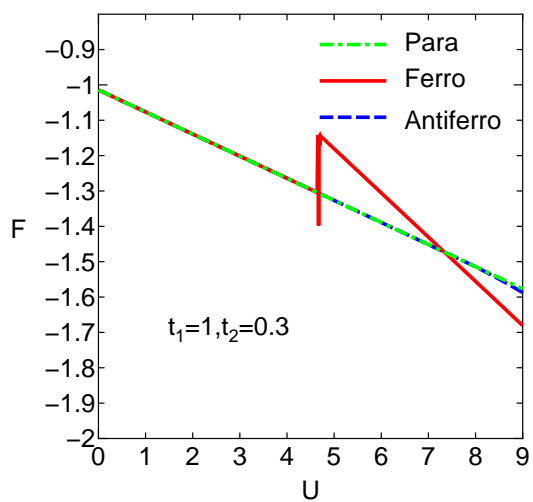


図 91:  $t_1 = 1, t_2 = 0.3$  の時の  $U - F$  図

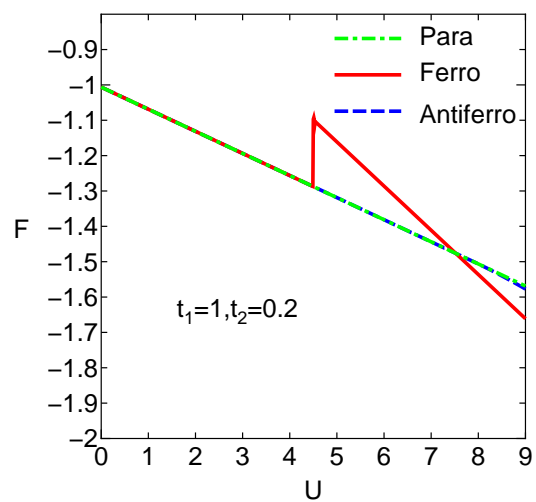
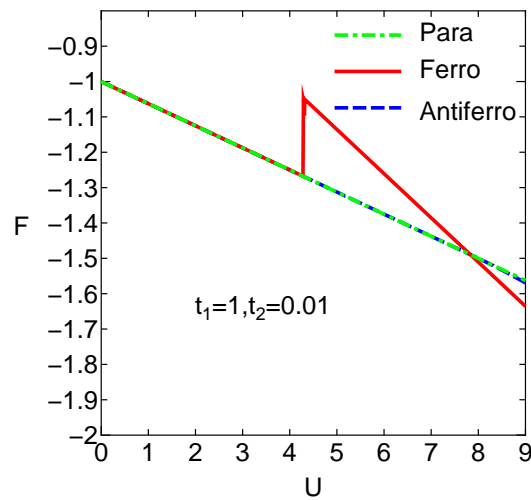
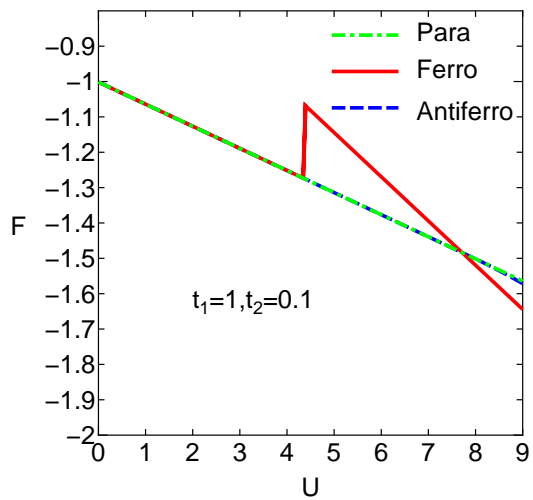
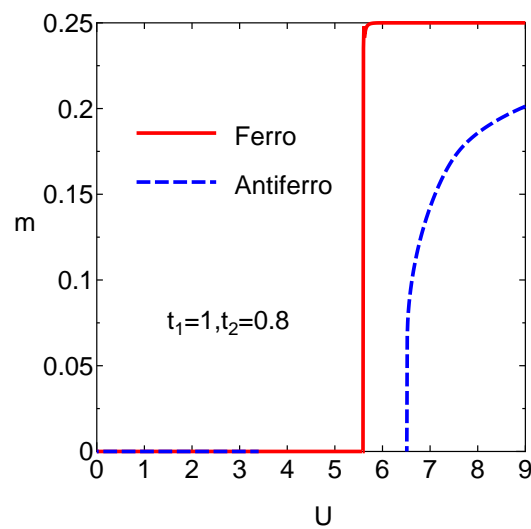
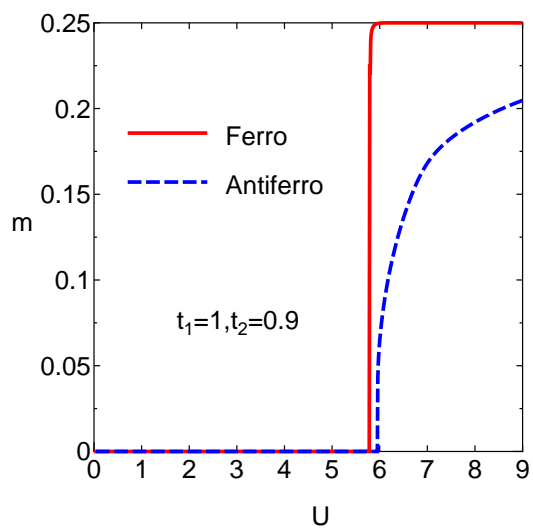


図 92:  $t_1 = 1, t_2 = 0.2$  の時の  $U - F$  図



☒ 93:  $t_1 = 1, t_2 = 0.1$  の時の  $U - F$  ☒

☒ 94:  $t_1 = 1, t_2 = 0.01$  の時の  $U - F$  ☒



☒ 95:  $t_1 = 1, t_2 = 0.9$  の時の  $U - m$  ☒

☒ 96:  $t_1 = 1, t_2 = 0.8$  の時の  $U - m$  ☒



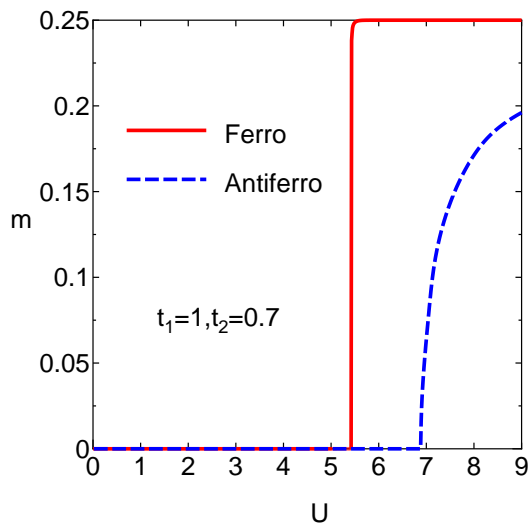


図 97:  $t_1 = 1, t_2 = 0.7$  の時の  $U - m$  図

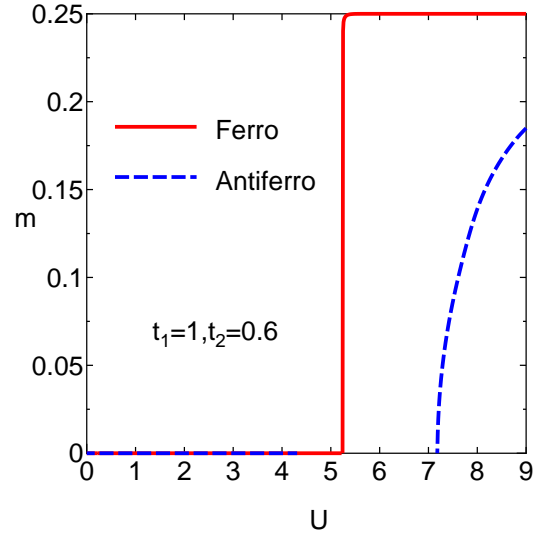


図 98:  $t_1 = 1, t_2 = 0.6$  の時の  $U - m$  図

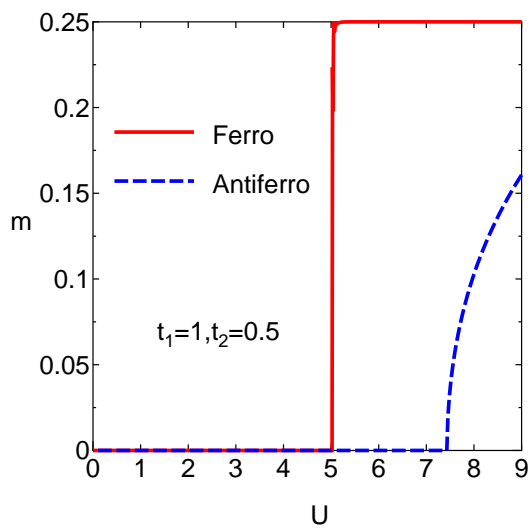


図 99:  $t_1 = 1, t_2 = 0.5$  の時の  $U - m$  図

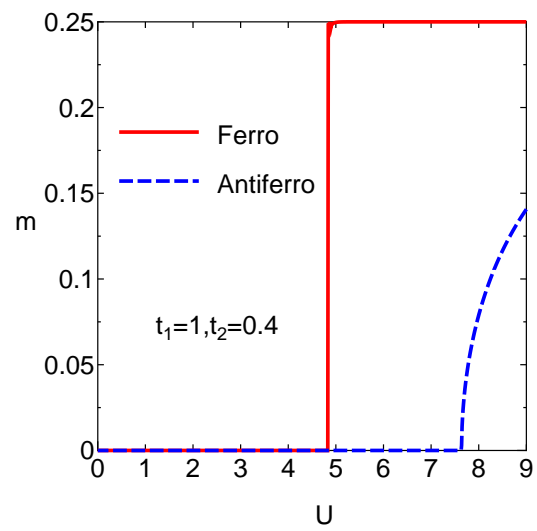


図 100:  $t_1 = 1, t_2 = 0.4$  の時の  $U - m$  図

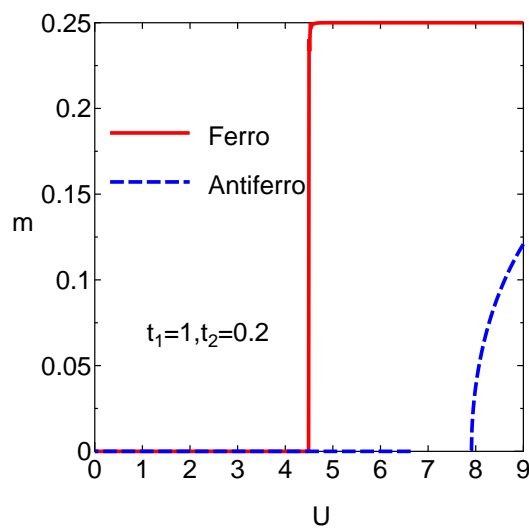
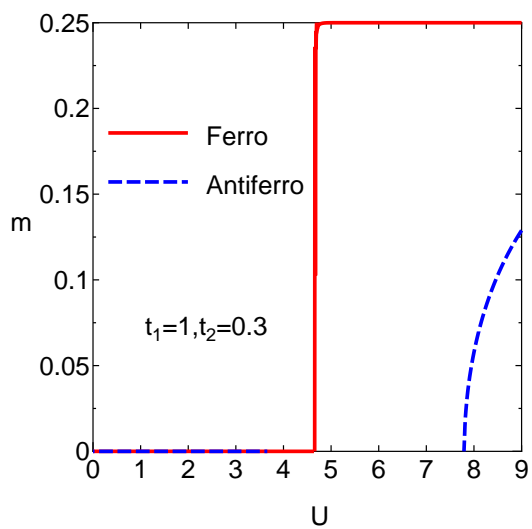


図 101:  $t_1 = 1, t_2 = 0.3$  の時の  $U - m$  図 102:  $t_1 = 1, t_2 = 0.2$  の時の  $U - m$  図

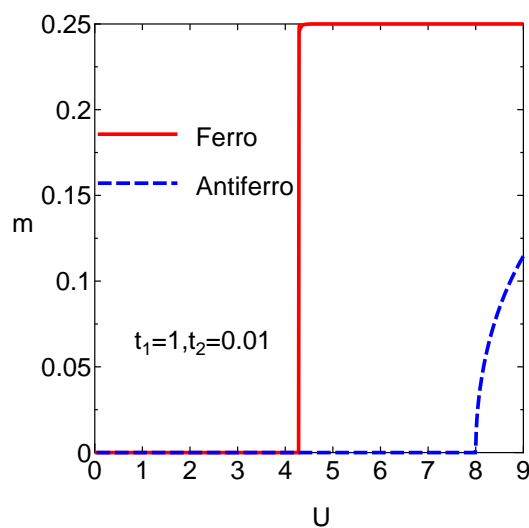
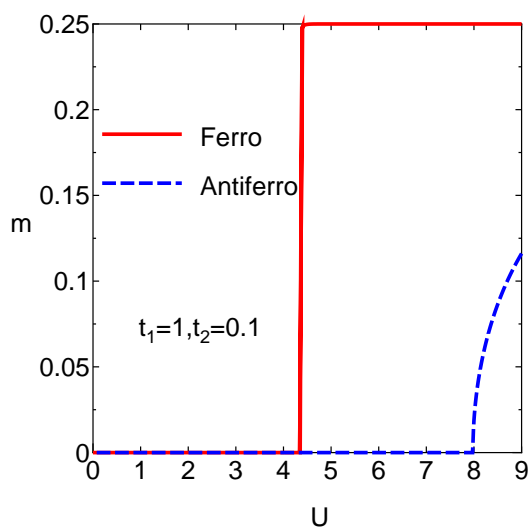


図 103:  $t_1 = 1, t_2 = 0.1$  の時の  $U - m$  図 104:  $t_1 = 1, t_2 = 0.01$  の時の  $U - m$  図

## 謝辞

本研究にあたり、指導教員の上田和夫教授には大変お世話になりました。日頃から熱心にご指導して頂き、物理学研究の奥深さを学ばせて頂きました。また、研究生生活の中で、物理学に限らない様々な事をお話しすることで、人間の幅を広げることができました。この場を借りて、感謝の意を記します。同研究室の柳有起さんには、日頃から数多くのアドバイスを頂き、幾度となく助けて頂きました。厚くお礼申し上げます。また、研究室部屋での生活でお世話になった同研究室の藤井達也助教、同期として研究生生活を共にした同研究室の守谷直くん、研究室を和やかにしてくれた同研究室の岡田大くん、身の回りのお世話を下さった秘書の江口浩子さんに感謝致します。

## 参考文献

- [1] Nagaoka Y, Phys.Rev.147 392 (1966).
- [2] Thouless D Proc.Phys.Soc.86 893 (1965).
- [3] A.Mielke, J.Phys.A:Math.Gen.24 L73-L77 (1991).
- [4] A.Mielke, J.Phys.A:Math.Gen.24 3311-3321 (1991).
- [5] A.Mielke, J.Phys.Lett.A 174 443 (1993).
- [6] Hal Tasaki, Progress of Theoretical Physics 99 489 (1998).
- [7] K. Ueda et al.,Phys.Rev.Lett. 76, 3822 (1996).
- [8] V. Eyert J. Comput. Phys. 124, 271 (1996).
- [9] I. M. Lifshitz: Sov. Phys. JETP 11 (1960) 1130 [Zh. Eksp. Teor. Fiz. 38 (1960) 1569].
- [10] 上田和夫,「磁性入門」,裳華房 (2011).