

チェッカーボード格子ハバード模型における常磁性相の磁気不安定性

○山下靖文(日大工・総合)

1. はじめに

チェッカーボード格子上のハバード模型(図1, t_1 : 最近接遷移積分, t_2 : 次近接遷移積分)は典型的なフラストレート系となっており, 遷移積分の値や, クーロン相互作用の大きさ, 電子数などを変化させた場合に, 様々な興味深い性質を持つことが知られている。我々は, t_1, t_2 の値を様々に変化させながら, チェッカーボード格子上の $1/4$ フィルドハバード模型の, 電荷および磁気秩序についての研究を行った[1]。

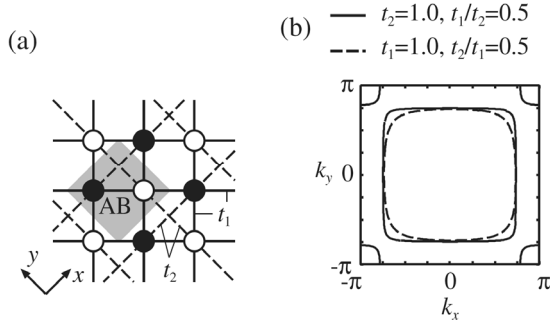


図1. (a) チェッカーボード格子の模式図。実線及び破線は, 2 種類の遷移積分 t_1, t_2 を表す。
(b) $1/4$ フィリングの場合のフェルミ面。

2. モデル・方法

チェッカーボード格子ハバード模型の運動エネルギー項 $\mathcal{H}_0$ は, 波数 $\mathbf{k}$, サブラティス $\alpha (= A, B)$, スピン $\sigma (= \uparrow, \downarrow)$ の電子の消滅演算子 $c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}$ を用いて,

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta\sigma} H_{0,\mathbf{k}}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma}$$

$$\hat{H}_{0,\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} 2t_2 \cos k_x & t_1(1 + e^{-ik_x})(1 + e^{ik_y}) \\ h.c. & 2t_2 \cos k_y \end{bmatrix}$$

と書き表される。相互作用項 $\mathcal{H}_I$ は,

$$\mathcal{H}_I = \frac{U}{N_A} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'q\alpha} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}'\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}$$

で与えられる。但し, N_A はユニットセルの数, U は電子間に働くクーロン斥力である。

以下では, 自由グリーン関数 $G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k})$ を用いて, 帯磁率 $\chi_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{q}) = -T/N_A \sum_{\mathbf{k}} G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}) G_{\beta\alpha}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{q})$ を計算し, その最大固有値 $\chi^{(0)}$ を数値計算によって求めた(図2)。乱雑位相近似を用いると, 常磁性相に相互作用を加えた場合に現れる, 磁気秩序相を決定することが出来る。

3. 結果・考察

図2(c),(f)に示す通り, $t_1/t_2 \simeq 1$ の領域では, $\vec{q} = 0$ に帯磁率のピークがあり, これは相互作用を加えた場合に現れる一様な強磁性相と良く対応している。また, 図2(a),(b)に示す, $t_1 < t_2$ の領域では, $q_x = \pi/2$ 及び $q_y = \pi/2$ の直線上にリッジ構造が見られる。これは, t_2 ボンド方向の1次元反強磁性秩序に対応し, 我々が平均場近似で求めた, 常磁性・反強磁性転移及び, $t_1 < t_2$ の領域における次元低下と良く一致している。さらに, $t_1 > t_2$ の領域では, 帯磁率は $\vec{q} = (\pi/2, \pi/2)$ 近傍に頂点を持ち, 2次元的な反強磁性秩序が存在することが示された。

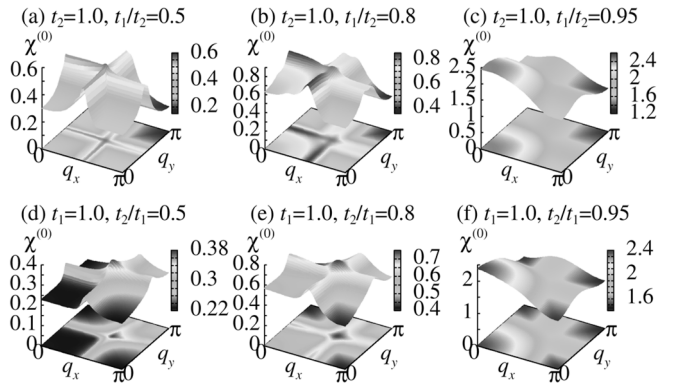


図2. 帯磁率 $\chi_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{q})$ の最大固有値 $\chi^{(0)}$ の波数 $\vec{q}$ 依存性 ($T/t=0.02$)。 (a)-(c) は $t_1 < t_2$ の1次元性が強い領域, (d)-(f) は $t_1 > t_2$ で2次元性が強い領域に対応している。

参考文献

[1] Y. Yanagi, Y. Yamashita, and K. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 123701 (2012).