

ハバード模型における軌道縮退効果

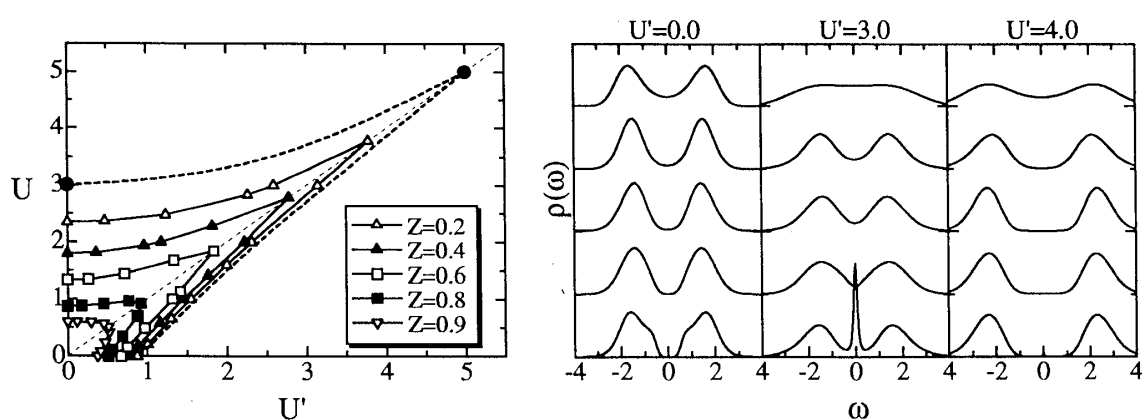
大阪大学大学院工学研究科 古賀昌久¹、大橋琢磨、今井剛樹、菅誠一郎、川上則雄

近年、縮退したバンドを持つ強相関電子系が注目を集めている。典型的な物質として知られているマンガン酸化物やルテニウム酸化物においては、巨大磁気抵抗効果やトリプレット超伝導などの興味深い現象が観測されている。また、重い電子的な挙動を示す遷移金属酸化物 LiV_2O_4 や最近盛んに研究されている f 電子系 CeTIn_5 ($T = \text{Rh, Co, Ir}$) においても軌道の自由度の重要性が指摘されている [1, 2, 3, 4]。このように、上記の物質において縮退バンドが重要な役割をしていることから、バンド間相互作用が金属的な性質にどのように影響を与えるのか明らかにする必要がある。

本講演では二重縮退したハバード模型を取り上げ、その低温における性質について議論した。ハミルトニアンは以下のとおりである。

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \sigma} t_{ij} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma} + U \sum_{i\alpha} n_{i\alpha\uparrow} n_{i\alpha\downarrow} + U' \sum_{i, \sigma, \sigma'} n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} + J \sum_i \mathbf{S}_{i1} \cdot \mathbf{S}_{i2}, \quad (1)$$

t, U, U', J はそれぞれ、サイト間のホッピング、バンド内のクーロン相互作用、バンド間クーロン相互作用、バンド間交換相互作用を表す。この縮退ハバード模型における金属相の安定性について調べるため、動的平均場近似 [5] を用いた。ここでは、有効不純物問題を解くため、厳密対角化法 [6] ならびに量子モンテカルロ法 [7] を利用し、局所的な電子相関効果について正確に取り扱った。



左: 繰り込み因子の等高線プロット。右: $U = 3.0$ の時の状態密度の温度変化の様子。上から順に $\beta = 1, 2, 4, 8, 16$

その結果、 $U \sim U'$ の時、軌道自由度に伴うゆらぎにより金属相が安定化されることを明らかにした [8, 9]。さらに、帯磁率の温度変化の振る舞いを解析することにより、相図の上半面 ($U > U'$)

¹ E-mail: koga@tp.ap.eng.osaka-u.ac.jp

における Mott 絶縁体と右半面 ($U < U'$) における Mott 絶縁体との磁氣的性質の違いを明らかにした。交換相互作用の符号 [強磁性 ($J < 0$)、反強磁性 ($J > 0$)] についても議論し、有効的な自由度が系の金属的性質と深く関連していることを明らかにした [8]。

謝辞

本研究における数値計算の一部は、京都大学基礎物理学研究所ならびに東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを用いて行いました。計算機の運用に携わっている管理責任者に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] H. Tsunetsugu, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1844 (2002).
- [2] Y. Yamashita and K. Ueda, preprint.
- [3] T. Takimoto, T. Hotta, T. Maehira and K. Ueda, J. Phys. Condens. Matter **14**, L369 (2002).
- [4] T. Hotta and K. Ueda, cond-mat/0211467.
- [5] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [6] M. Caffarel and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **72**, 1545 (1994).
- [7] J. E. Hirsch and R. M. Fye, Phys. Rev. Lett. **56**, 2521 (1986).
- [8] A. Koga, Y. Imai and N. Kawakami, Phys. Rev. B **66**, 165107 (2002).
- [9] Y. Ono, M. Potthoff and R. Bulla, cond-mat/0206508.