

Appearance of extended ferromagnetic states in Lieb-ferrimagnetic models by strongly-correlated effect

大阪大学 大学院理学研究科 渡部 祐己¹
東京大学 大学院工学系研究科 宮下 精二²

1 これまでの経緯

遍歴電子系において、パウリの排他律に従った電子の運動とスピンに陽には依らないクーロン相互作用だけから強磁性状態は出現し得るのかという問題を出来るだけ正面から追究するために、我々はこれまで1次元平坦バンド模型 (Mielke-Tasaki model) を例にとって数値的にその基底状態の磁性を調べてきた。[1, 2] この模型は $1/4$ フィリングでは平坦バンド強磁性が、またハーフフィルドに1ホール加えた場合は ($U = \infty$ で) 長岡の強磁性が出現することが厳密にわかっていた。厳密対角化による計算の結果、相互作用が十分強い場合の高電子数領域 (丁度、上の厳密な結果の間の領域) の磁性は、奇電子数では完全強磁性状態、また偶電子数ではシングレットとなることが得られた。[1] 但しそのシングレット状態の相関関数を調べてみると、系の半分程度まで強磁性的な相関を持った状態、いわゆるスパイラル状態であることも確かめられた。[2] この結果は、この模型においては広い電子数領域で相関関数の意味では強磁性的な状態 (我々はこれを extended ferromagnetic state と呼ぶ) が出現するということを示している。これは磁氣的相互作用を陽には含まないタイプの模型において広い範囲で強磁性的状態の出現が確かめられた初めての例であった。ではこのような強磁性的状態を支えるものはどのような特徴なのであろうか。

2 3つの特徴、3つの模型

平坦バンド模型において特徴的な構造は三つあった。(i) 平坦バンドの存在、(ii) 長岡の定理が適用できる格子構造、(iii) 局所ループ構造、である。ここで、長岡の定理が適用できるということはハーフフィルドに1ホールを加えた場合に Connectivity 条件が満たされるということあり、また局所ループ構造とは三角形または四角形の単位セルから格子が構成されていることを指しているとする。三角または四角形の場合を特別に取り扱う訳は、それら自身1ホール以上で常に Connectivity 条件を満たすからである。

¹ E-mail:wata@godzilla.phys.sci.osaka-u.ac.jp

² E-mail:miya@yuragi.t.u-tokyo.ac.jp

三つの特徴のどれが強磁性的状態の出現に重要なのかを調べるために、ここでこれらの特徴の満たし方の違うモデルを導入する。(A)Periodic Diamond chain (PD): (i)(ii)(iii) の全てを持つ、(B)Periodic Alternately-Attached leg chain (PAAL): (i) のみを持つ、(C)Open Diamond chain (OD): (i)(iii) を持つ、の三つである。(図1を見よ)

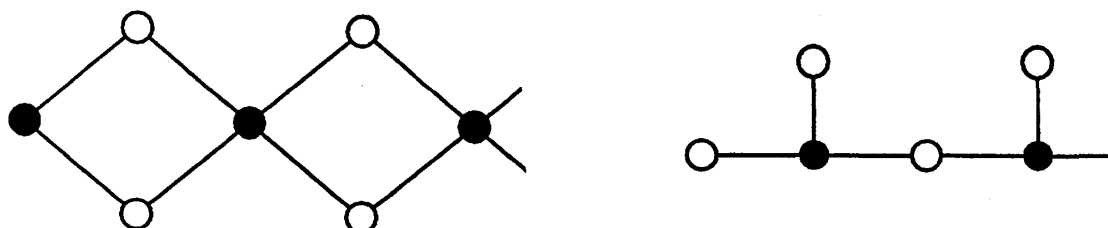


図 1: PD, OD (左) と PAAL (右) の格子構造

3 計算結果の比較

以下の計算では常に $U = \infty$ とし、電子数の多いところを中心に結果を述べることにする。また「高電子数」とは単位セルに平均 1 ホール未満（ハーフフィルドは除く）である事とする。

まず、12 サイト系の PD と PAAL の結果（周期境界と反周期境界）を見てみる。(表 1) PD では高電子数領域 (電子数 9~11) では強磁性的状態 (extended ferromagnetic state) が

$L = 12$ N_e	The PD chain		The PAAL chain	
	periodic	anti-periodic	periodic	anit-periodic
11	Nagaoka Ferro.	Spiral State	Para (disconnect)	Para (disconnect)
10	Spiral State	Saturated Ferro.	Singlet	Singlet
9	Saturated Ferro.	Spiral State	Singlet	Singlet
8	Singlet	Singlet	Singlet	Singlet
7	Singlet	Singlet	Singlet	Singlet

表 1: 電子数 7~11 の基底状態の磁性

出現しているのに対し、PAAL では調べた全ての電子数において非磁性であった。この結果は、まず「平坦バンドの存在は強磁性的状態を作り出すのに一般には不十分であること」を示している。

更に 10 サイトと 16 サイト系の OD の結果を見てみる。(表 2) ここでも高電子数領域は（長岡の定理が適用出来ないのが当然だが）1 ホールを除いて強磁性状態となっている。このことは強磁性状態の出現に重要な構造は局所ループ構造であるということを示している。またここで、この結果は長岡の定理が適用出来ない格子において広い電子数領域で強磁性が現れた初めての例となっていることを注意しておく。

	10 sites	16 sites
1 hole	Disconnect	Disconnect
2 holes	Saturated Ferro.	Saturated Ferro.
3 holes	singlet	Saturated Ferro.
4 holes	singlet	Saturated Ferro.
5 holes	singlet	singlet

表 2: ホール数 1~5 の基底状態の磁性

4 得られた描像

今までの結果で強磁性的状態が現れた場合の様子をまとめてみよう。まず、いずれも高電子数領域においてであって電子数を下げるとシングレットとなった。また局所ループ構造は必ず存在している。これはこれまでに知られていた他の模型においても共通している。ここで更に長岡の定理の役割について考察する。長岡の定理が適用できるためには1ホールで connectivity 条件が満たされることが必要であったが、OD や PAAL においても実は2ホール以上ならば connectivity 条件が満たされるのである。即ち、OD で2ホール以上で強磁性的状態が出現したのは、局所ループ構造の存在と connectivity の回復にあったと考えられる。

これらの考察から我々は強磁性的状態の出現の機構に関して、次のような描像を得ることが出来る。それは「局所ループ上の電子の（量子力学的）運動によって局所モーメントが作られ、それが更に相関し合いながら大域的な電子の（量子力学的）運動によって全体の強磁性を形成する」というものである。この描像は、電子数を下げれば単位セルに平均1ホール以上となり独立に運動し得るために強磁性とならないことや、また PAAL では局所ループが存在しなかったためにそもそもモーメントが発生せず強磁性とならないことも説明できる。更にこの描像は、強磁性的状態をもつ他の模型においても（局所モーメントの発生の機構を、例えばスピン交換相互作用に置きかえれば）常に成立しており、その意味で普遍的な描像となっているといえる。（今回紙数の関係で省略した計算や議論の詳細は [3] を参照のこと）

参考文献

- [1] Y. Watanabe and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997), 2123.
- [2] Y. Watanabe and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997), 3981.
- [3] Y. Watanabe and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. 投稿中.