

論文内容の要旨

論文題目: Effects of Geometrical Frustration
in Strongly Correlated Systems

(強相関係における幾何学的フラストレーションの効果)

氏名: 是常 隆

銅酸化物高温超伝導体の発見以来、強い電子相関のある系に対して様々な研究が行われてきた。しかし、強相関の効果については、まだ分からないことが多く残されている。その中でも本研究では、格子形状の効果、特に幾何学的フラストレーションを持つ格子における強相関の効果について研究した。

幾何学的フラストレーションを持つ格子については、これまで主にスピン系において研究がなされてきた。スピン系では、古典的秩序(ネール秩序)がフラストレーションによって不安定になり、量子的な状態が実現することがある。この意味で、スピン系におけるフラストレーションの効果は分かりやすいと言える。一方、電子系においてはフラストレーションの効果はこのような明確な認識はされていなかったように思われる。この理由は、電子相関が弱ければ格子の効果はバンド分散の変化としてとりこまれてしまうと考えられていたためであると思われる。格子の効果が変わるためには、スピン系と同様に、かなり強い電子相関のある系を考えなければいけない。しかし、一般に強相関とフラストレーションを同時に扱うということは非常に困難であるため、このような研究はこれまであまりなされていなかった。幾何学的フラストレーションのある格子における強相関電子系の研究として代表的なものには、ハバード模型における強磁性の研究があるが、そのほとんどは厳密な数理解物理的方法や一次元系における信頼できる数値計算に限られており、一般的なフラストレーションの効果について議論されているものはほとんどない。

一方、強相関電子系におけるフラストレーションの効果として、スピン系における RVB 状態という量子的な状態が、正孔をドーピングしたときにどのように現われるかという興味がある。電子系における RVB 状態とは高温超伝導を説明するために導入された概念であるが、スピン系では高温超伝導体のモデルである正方格子よりもフラストレーションがあった方が RVB 状態になりやすいと考えられている。したがって、フラストレーションのある電子系における RVB 状態の実現可能性は非常に興味深い問題である。さらに、このような理論的な興味に加え、近年、 Na_xCoO_2 や有機導体である $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{X}$ などにおいてほぼ三角格子もつ物質が見つかっており、その中には超伝導を示すものも見つまっている。

そこで、本研究では典型的な幾何学的フラストレーションをもつ格子である三角格子、および、かごめ格子における t - J 模型に対して、高温展開法という手法を用いてその性質を調べた。高温展開法は強相関とフラストレーションを厳密に扱える数少ない手法のひとつであり、低温への外挿という困難があるものの、様々な性質を明らかにすることに成功した。特に、 t - J 模型のパラメータであるホッピング t の符号によって、系の性質が全く変わってしまうことが明らかになった。

まず、 $t > 0$ の場合を考える。この場合、三角格子およびかごめ格子ともに正孔濃度 $\delta = 0.2\text{-}0.4$ のあたりで、帯磁率が高温から減少する傾向を持つことがわかった。これは $t < 0$ の場合と比べても明らかに異なる。また、エントロピーも同様の温度領域において減少がみられる。ハイゼンベルグ模型の場合に RVB 状態がより安定であると考えられているかごめ格子の方が、この傾向が強い。また、最近接スピン相関はドーピングすることで成長することが分かった。これらのことは、ハイゼンベルグ模型 ($\delta = 0$) の場合にはフラストレーションのために低エネルギー領域にほぼ縮退していた状態のなかから、正孔をドーピングすることによって RVB 状態が安定化したことを示唆していると考えられる。フラストレーションのある系に正孔を導入することによって RVB 状態が実現するのではないかということは以前から考えられていたが、はじめて数値的にその可能性を示すことに成功した。

次に、 $t < 0$ の場合を考える。この場合、相図上の非常に広い領域で帯磁率が $T \rightarrow 0$ で発散していくように見えることがわかった。実際には 2 次元系であるために、 $T = 0$ で強磁性になると思われる。 $J = 0$ の場合には、エントロピーの低温への外挿が非常に精度よく行うことができ、その結果得られた基底状態のエネルギーも強磁性を示唆している。また、かごめ格子でも同様の解析を行ったが、この場合も強磁性領域が広い範囲に存在し、長岡の強磁性と低電子密度領域での平坦バンド強磁性とがつながっていることを示した。さらに、強磁性の安定性に対する変分計算を行ないこの結果を支持する結論を得た。以上の結果は、フラストレーションのある格子においては長岡の強磁性が一般に安定で、低電子密度の強磁性に関する理論、すなわち平坦バンド強磁性や金森理論と長岡の強磁性とが連続的につながっていることを表している。

このようにして得られた、 $t > 0$ における RVB 状態と $t < 0$ における強磁性状態はフラストレーションをもつ系に一般的なことであると考えられる。その理由としては、三角格

子とかごめ格子において、細かな振舞いに違いはあるもののほぼ同様の結果が得られたこと、フラストレーションの最も基本である3サイトのモデルでも t の符号にあわせて RVB 状態と強磁性が生じることを示せることが挙げられる。さらに、フラストレーションのある系ではバンド構造が $t > 0$ と $t < 0$ の場合で非対称になり、 $t < 0$ の方が状態密度が大きく強磁性に有利であると考えられることも理由の1つとして挙げられる。

得られた RVB 状態が超伝導を示すかどうかに関して、三角格子において超伝導関連の計算を行い、どのような対称性の超伝導が起こりうるか調べた。その結果、1/2 充填近傍から RVB 状態が期待される領域では d 波超伝導の相関が発達することを示した。一方、強磁性的な領域の近傍では、トリプレット超伝導の相関が発達することが確かめられた。特に、低電子密度領域ではハバードモデルでも示唆されている f 波超伝導の相関が発達することが分かった。このように、フラストレーションのある系では様々な超伝導の可能性を示すことができた。

一方実際に超伝導を示す $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ や $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_4\text{Hg}_{2.89}\text{Br}_8$ などとの対応はまだ困難が残っている。 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ では軌道の効果が効いてくる可能性もあり、単純な三角格子とみなせるかという問題がある。また、 $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_4\text{Hg}_{2.89}\text{Br}_8$ などでは $t < 0$ の強磁性と反強磁性の競合する領域にあると考えられるため、現段階でははっきりしたことは言えない。

以上のように、実験との対応には問題が残るものの、幾何学的フラストレーションに起因すると考えられる様々な現象を明らかにした。今後の課題としては、より低温での振舞い、特に低電子密度における強磁性や強磁性とトリプレット超伝導との関係、RVB 状態と思われる領域の基底状態を調べることなどがあげられる。また、高温展開法では調べられなかった動的性質も興味深い問題である。