

## 論文内容の要旨

論文題目 Variational Cluster Approach to Quasi-Two-Dimensional Hubbard Model  
(変分クラスター法を用いた擬二次元ハバード模型の研究)

氏名 吉川 俊彦

強相関電子系における幾何学的フラストレーションの効果は、凝縮系物理学の分野において大きな注目を集めている。三角、カゴメ、スピネル、パイロクロア格子上の幾何学的フラストレーションを持つ量子磁性体や、グラファイト上のヘリウム3の三角構造に対する最近の実験的研究に関連して、幾何学的フラストレーションを持つ格子上的ハバード模型の研究が精力的に行われている。

幾何学的フラストレーションは、系の磁氣的性質に大きな影響を及ぼすことは広く知られている。それは、量子効果を増大させ、古典的な磁氣的秩序を破壊し、量子スピン液体相のような非自明な量子相を出現させる効果がある。また、系の次元性も磁氣的性質に強い影響を与えることが広く知られている。実際、三次元系がそれよりも低次元の系と比較して磁氣的秩序化の傾向が強いことが知られている。したがって、系の磁氣的性質に対する幾何学的フラストレーションの効果と次元性の効果は、互いに競合する関係にあることが理解できる。しかし、多くの場合において、その競合の結果現われ得る量子相の性質の詳細や、他相との競合関係については議論が行われている最中である。そこで、本学位論文では、幾何学的フラストレーションを持つ三次元ハバード模型における、幾何学的フラストレーションと次元性の競合と、それがもたらす磁氣的性質への影響について調べた。

本学位論文では、正方格子が垂直方向に積層した擬二次元  $t$ - $t'$  ハバード模型を考察した。この模型の格子構造と各ホッピングパラメーターを **Figure 1** に示した。計算は、ハーフフィリング、絶対零度の条件で行った。また、強相関における磁氣的性質を調べるために、

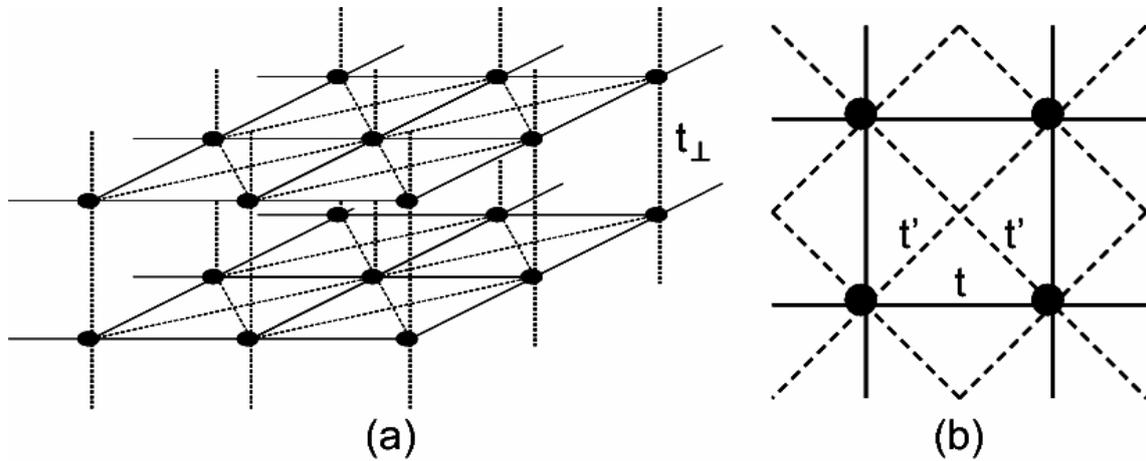


Figure 1: (a)本学位論文で用いた三次元格子の構造。(b)二次元面内におけるホッピングパラメーター $t$ と $t'$ 。面間のホッピングパラメーター $t_{\perp}$ も(a)に示した。

クーロン斥力の値を  $U/t=10$  に固定した。

ところで、高次元における幾何学的フラストレーションを持つハバード模型の理論的取り扱い、多くの一般的な多体系の手法にとって困難である。実際、量子モンテカルロ法は、幾何学的フラストレーションが存在する場合、計算の実行が困難な場合がある。また、密度行列繰り込み群法や厳密対角化法は、少なくとも現在のところ、低次元系に対する適用に限られている。そこで、我々は、強い電子相関効果、幾何学的フラストレーションの効果、次元性の3つを取り扱うために、variational cluster approach (VCA、変分クラスター法)を用いた。

chapter 1 で本学位論文全体の Introduction を示した後、chapter 2 では、VCA の理論的背景を述べた。VCA は、cluster perturbation theory (CPT) の変分原理に基づいた一般化である。その一般的な変分原理は、self-energy-functional theory (SFT) と呼ばれている。CPT では、系を孤立したクラスターに分割し、各クラスターの問題を厳密対角化を用いて厳密に解く。そして、クラスターを strong coupling perturbation theory によって結合する。SFT に基づき、クラスターの自己エネルギーは変分的に最適化される。これによって、我々は自発的対称性が破れた相を取り扱うことができる。VCA の利点として、local の、および、off-site の短距離の電子相関効果を厳密に取り扱うことができる。したがって、VCA は、我々の模型のように強い量子効果が支配する系を取り扱うために強力な手法となり得る。

chapter 3 では、ハーフフィリング、基底状態における二次元 $t$ - $t'$ ハバード模型についての既知の性質を紹介した。この模型は、我々の模型の特別な場合 ( $t_{\perp}=0$ ) に相当するため



ニアな磁気秩序相への直接的転移が起こることが分かった。

- ・ 反強磁性相から常磁性モット絶縁体相への転移は二次転移であり、コリニアな磁気秩序相から常磁性モット絶縁体相および反強磁性相への転移は一次転移であることが分かった。

$U$ が大きい極限では、対応する $J_{\parallel}$ と $J_{\perp}$ は、それぞれ $J_{\parallel} \sim 4t^2/U$ と $J_{\perp} \sim 4t_{\perp}^2/U$ のように表される。したがって、 $t_{\perp}^*/t \sim 0.44$ は $J_{\perp}^*/J_{\parallel} \sim 0.19$ に対応する。このかなり小さな $J_{\perp}^*/J_{\parallel}$ の値から、次のことが明らかになった。すなわち、我々が得た量子相は、強い電子相関効果と幾何学的フラストレーションの効果によって引き起こされたものであるが、その安定性は、厳密に二次元の系では広い $t$ のパラメーター領域で安定であることから分かるように強固であるが、かなり小さな次元性の導入によって急速に不安定になり、その量子相は最終的に消滅する。これらのことよって、強い電子相関効果と幾何学的フラストレーションの効果に加えて低次元性の存在が、非自明な量子相の出現という魅力的な物理的現象の鍵を握っていることが分かった。さらに、現実の物質は層間のホッピングの存在によって厳密には二次元ではなく、もう一つの次元に対して非常に敏感であるので、現実の物理系における量子現象を正確に調査し、評価するためには、たとえその値が小さくとも、真実の次元性を考慮に入れることが常に必要であるということが分かった。

最後に、chapter 5では、本学位論文全体のまとめを示した。