

平成 28 年 6 月 15 日現在

機関番号：22604
研究種目：基盤研究(C) (一般)
研究期間：2013～2015
課題番号：25400357
研究課題名(和文) CaV_{40_9}型格子ハバード模型における量子臨界現象の研究

研究課題名(英文) CaV_{40_9}

研究代表者
上田 和夫 (UEDA, Kazuo)
首都大学東京・理工学研究科・教授

研究者番号：70114395

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：CaV₄₀₉型格子は正方格子から格子点を周期的に1/5欠損させた格子で単位胞に4個の格子点を含む多軌道系である。この格子上を運動する電子系に対するハバード模型は金属絶縁体転移、磁気相転移等が絡み合った多様な量子相転移を示すことを明らかにした。電子数がサイトあたり1/2である場合の基底状態相図については平均場近似を用い、電子数がサイト当たり1個の場合の量子相転移についてはクラスター動的な平均場近似(DMFT)を用いて研究を進めた。最近脚光を浴びているFeSiおよびFeGeを念頭に、多軌道ハバード模型における金属絶縁体転移に伴う磁性の出現という観点でその特徴を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：The two-dimensional lattice of the CaV₄₀₉ type is the regularly one-fifth depleted square lattice whose unit cell contains four sites. We have clarified that the Hubbard model on this lattice shows rich variety of metal-insulator transitions as well as magnetic transitions. For this purpose we use the mean field approximation at the quarter filling, while the dynamical mean field theory is employed at the half filling. Difference between the nonmagnetic semiconducting ground state of FeSi and the magnetic metallic one of FeGe is understood in the light of quantum phase transitions in the multi-orbital systems.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 量子相転移 金属絶縁体転移 ディラック電子 スピンギャップ

1. 研究開始当初の背景

CaV4O9 型格子は正方格子から格子点を周期的に $1/5$ 欠損させた格子である[1]。この格子の単位胞は、4 個の格子点を含むので、この格子上のハバード模型を考えると、格子点当たりの軌道は一個であっても、一般的な意味での多軌道系を扱っていることになる。この格子はダイマーボンドで覆うこともできるし、プラケットで覆うこともできる。従って、ハバード模型のハーフフィリングにおける強相関極限の有効模型であるハイゼンベルグ模型を考えると、ダイマーボンドが強い極限でダイマーシングレットの基底状態を持ち、プラケットボンドが強い極限ではプラケットシングレットが基底状態となる。これら二つの非磁性基底状態は異なる相になっている。二つの交換相互作用が拮抗する領域では反強磁性秩序を持ち、二つの結合定数の比を変化させたときに二度量子相転移を示すことが我々の以前の研究によって確立されている[2]。従って、電子の遍歴性を回復するハバード模型に立ち返って、クーロン相互作用が弱い極限から次第に相互作用を大きくしていくときに起きると期待される金属絶縁体転移の様相が、ダイマーボンドとプラケットボンドの跳び移り積分の相対的な大きさを変えたときに変化し、両極限で性質の異なる金属絶縁体転移が実現されている期待がある。さらに $1/2$ フィリングだけでなく $1/4$ フィリングなどの電子数密度が異なる場合を考えると、金属絶縁体転移と磁気転移が絡み合った多様な量子相転移を研究する格好な舞台となっていることが期待される。

2. 研究の目的

CaV4O9 型格子上のハバード模型を対象として、その $1/2$ フィリングと $1/4$ フィリングにおける金属絶縁体転移と磁気秩序の相関を研究することにより多軌道系における量子相転移の特徴を明らかにすることを第一の目標とする。これは二次元のハバード模型という理論的なモデルを用いた研究であるが、多軌道系の量子相転移の多様性について、研究の端緒を開くことが期待される。最近スキルミオンに関連して B20 構造を取る MnSi や FeSi、FeGe 等の物質の磁氣的、電氣的性質が再度脚光を浴びている。FeSi は低温では非磁性の半導体であるにも関わらず高温では磁化率がキュリーワイス則を示す、特異な半導体として知られている。それと同様な価電子配置を持つ FeGe は MnSi と同様ヘリカル秩序を持つ金属磁性体である。格子系を対象として多軌道系の量子相転移を扱う理論的枠組みの整備が出来たのち、FeSi および FeGe がその電子状態がきわめて近いにもかかわらず、

非常に違った性質を示すことを理論的に説明することを試みる。

3. 研究の方法

金属絶縁体転移の研究は、膨大な研究の積み重ねがあるが、単一軌道でハーフフィリングの場合を中心に研究がなされてきた。このプロジェクトで最初に注目した $1/4$ フィリングの場合は余り調べられていないこともあり、多体問題の常套手段としてまず平均場近似で基底状態相図を求めることから研究を開始した。 $1/4$ フィリングでは強相関極限で強磁性となり易い性質があることが認識されている。強磁性状態では電子相関の役割はあまり重要ではないので、その意味でも平均場近似を用いることは意味のあるアプローチである。

$1/2$ フィリングの場合の量子相転移についてはクラスター動的平均場近似(DMFT)を用いて研究を進めた。動的平均場近似では、周期系の多体効果を一個のクラスターに対する不純物問題に落として、その不純物問題を自己無撞着に解くことになる。不純物問題のソルバーとしては連続時間量子モンテカルロシミュレーションを用い、クラスターサイズについては 4 サイトと 8 サイトについて計算を実行した。

FeSi および FeGe は B20 構造をとり単位胞に分子式 4 個分の原子を含んでいる。フェルミエネルギー近傍の電子状態には Fe の 3d 電子と Si ないし Ge の p 電子が関与している。われわれは Wien2k を用いてバンド計算を実行し、最適ワニエ軌道でフィッティングすることにより 32 軌道ハバード模型を構築した。クーロン相互作用と交換相互作用については、動的平均場近似を用いたが、その不純物問題の解法としては多軌道系に容易に拡張できる二次摂動を用いた。

4. 研究成果

CaV4O9 型格上のハバード模型において電子数がサイト当たり $1/2$ ($1/4$ フィリング)である場合の平均場近似による基底状態相図については、以下のような結果を得た。ダイマー側の弱結合領域は非磁性絶縁体であり、強結合領域になると強磁性金属相に一次転移をする。プラケット側の弱結合領域は常磁性金属相が安定であるが、クーロン相互作用を大きくするにつれ、反強磁性金属相へと二次相転移をし、そこから反強磁性絶縁体相に一次転移をすることが明らかになった。この反強磁性絶縁相はダイマーボンドにスピンの生じるボンド反強磁性である。ダイマー間のホッピングが無限小の極限では、このボンド反強磁性状態が基

底状態であることを厳密に示した。さらに強結合領域に行くとき基底状態は、強磁性金属または強磁性絶縁体となるがその境界は、ダイマー内のホッピングとダイマー間のホッピングが2対1の所である。プラケット側の常磁性絶縁体相とダイマー側の反強磁性相との間の量子相転移は、SU(3)に埋め込まれたディラック電子の有効模型で記述されることが明らかになった。これらの結果は、論文[3, 4]にまとめられている。

電子数がサイト当たり1個(1/2フィリング)の量子相転移についてはクラスター動的平均場近似(DMFT)を用いて研究を進めた。この研究プロジェクトの成果として以下のことが明らかになった。プラケット側では金属絶縁体転移が、正方格子のときと同様の一次転移で起きる。一方ダイマー側では、ダイマー内のホッピングとダイマー間のホッピングが2対1になるまでは、バンド絶縁体から強相関のダイマー絶縁体にクロスオーバーをし、それ以下のときは連続的な金属絶縁体転移をすることが分かった。この転移はリフシツク転移として理解されることを明らかにした。このように、金属絶縁体転移の様相は一通りではなく、格子の形状に応じて、おそらく一般的には、系毎に異なる運動エネルギーの特徴によって異なる様相を示すことが明らかになった。これらの結果は論文[5, 6]にまとめられている。

ここで見いだされた性質の異なる金属絶縁体転移がどのように移り変わって行くかは興味深い問題である。とくに、いずれかのパラメータ領域に非磁性の金属相があるとすれば、その興味はいっそう深まること期待される。しかし、CaV4O9型格子は正方格子から格子点を取り去ることによって構成される格子であることからわかるように、二分割可能な格子であり、無限小の相互作用で反強磁性秩序が誘起されることが期待される。実際、我々の研究に触発されて、量子モンテカルロシミュレーションと変分計算が同じモデルに対して実行された[7, 8]。両者の結果は、互いに矛盾がなく、二つの非磁性絶縁相は常に反強磁性絶縁相によって隔てられている。クラスター動的平均場近似の実行可能なクラスターサイズは8サイト程度で有り、サイズ外挿をすることは現状では難しいばかりでなく、量子モンテカルロシミュレーションと変分計算の結果は物理的にも合理的であると考えられる。

B20構造をとるFeSiおよびFeGeは単位胞に分子式4個分の原子を含んでいる。フェルミエネルギー近傍の電子状態にはFeの3d電子とSiないしGeのp電子の成分が支配的である。Wien2kを用いたバンド計算の結果を、最適ワニエ軌道でフィッティ

ングすることにより32軌道ハバード模型を構築し、バンド計算の結果がよく再現されることを確かめた。クーロン相互作用と交換相互作用については、DMFTを用いたが、その不純物問題の解法としては自己無撞着な二次摂動を用いた。その結果、合理的な範囲にある共通の相互作用定数を用いて、FeSiの基底状態が半導体であるのに対して、FeGeではFeあたり1ボア程度の磁化を持つ強磁性金属であることが示された。温度を上げていくと、FeSiは半導体から金属にクロスオーバーしていくのに対し、FeGeでは強磁性金属から常磁性金属へと相転移をすることが無理なく記述され、この興味深い系の特徴が説明された[9]。

最近、安岡氏、元屋氏およびその共同研究者達は、MnSiおよびFeGeのヘリカルスピ状態における核磁気共鳴の実験を報告している。これらは、多軌道系における量子相転移点近傍におけるスピンの動的揺らぎという興味深い問題を今後の問題として提供している[10]。

References

- [1] K. Ueda et al.: Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 1932.
- [2] M. Troyer et al.: Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 3822.
- [3] Y. Yamashita, M. Tomura, Y. Yanagi, and K. Ueda: Phys. Rev. B **88** (2013) 195104.
- [4] Y. Yamashita, M. Tomura, Y. Yanagi, and K. Ueda: JPS Conf. Proc **3** (2014) 016012.
- [5] Y. Yanagi and K. Ueda: JPS Conf. Proc. **3** (2014) 013005.
- [6] Y. Yanagi and K. Ueda: Phys. Rev. B **90** (2014) 085113.
- [7] Han-Qing Wu et al.: Phys. Rev. B **91** (2015) 125128.
- [8] Atsushi Yamada: Phys. Rev. B **90** (2014) 245139.
- [9] Y. Yanagi and K. Ueda: Phys. Rev. B **93** (2016) 045125.
- [10] H. Yasuoka and K. Motoya, et al.: J. Phys. Soc. Jpn **85** (2016) to appear.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 5件)

Y. Yanagi and K. Ueda,
Unified treatment of theory on magnetic properties of FeGe and FeSi,
Phys. Rev. B, 査読有 **93** (2016) 045125.
DOI: 10.1103/PhysRevB.93.045125

Y. Yamashita, M. Tomura, Y. Yanagi, and K. Ueda,
Magnetic Phases and Edge States of the 1/5-Depleted Square-Lattice Hubbard Model at 1/4 Filling,
JPS Conf. Proc, 査読有, **3** (2014) 016012.
DOI:http://dx.doi.org/10.7566/JPSCP.3.016012

Y. Yanagi and K. Ueda,
Quantum Phase Transition in the 1/5-Depleted Square Lattice Hubbard Model,
JPS Conf. Proc. 査読有, **3** (2014) 013005.
DOI:http://dx.doi.org/10.7566/JPSCP.3.013005

Y. Yanagi and K. Ueda,
Continuous Mott transition in a two-dimensional Hubbard model,
Phys. Rev. B, 査読有, **90** (2014) 085113.
DOI: 10.1103/PhysRevB.90.085113

Y. Yamashita, M. Tomura, Y. Yanagi, and K. Ueda,
SU(3) Dirac Electrons in the 1/5-Depleted Square-Lattice Hubbard Model at 1/4-Filling,
Phys. Rev. B, 査読有, **88** (2013) 195104-1-7.
DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.195104

[学会発表](計 6件)

Yuki Yanagi and Kazuo Ueda,
Dynamical mean field study on magnetic properties of FeSi and FeGe,
Second international workshop on "Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials",
2015年9月30日
Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, ドレスデン(ドイツ)

柳有起、上田和夫、
FeSi および FeGe の磁氣的性質の動的平均場理論による研究、
日本物理学会 2015 年秋季大会
2015 年 9 月 19 日
関西大学(大阪府・吹田市)

柳有起、上田和夫、
FeSi 及び FeGe の電子状態と磁氣的性質、
日本物理学会第 70 回年次大会
2015 年 3 月 22 日
早稲田大学(東京都・新宿区)

柳有起、上田和夫、
2次元ハバード模型におけるリフシツツ転移、
日本物理学会 2014 年秋季大会
2014 年 9 月 9 日
中部大学(愛知県・春日井市)

柳有起、上田和夫、
1/5 周期欠損正方格子ハバード模型における金属絶縁体転移、
日本物理学会第 69 回年次大会
2014 年 3 月 28 日
東海大学(神奈川県・平塚市)

山下靖文、都村正樹、柳有起、上田和夫、
1/5 欠損正方格子ハバード模型における SU(3)ディラック電子と磁気相図、
日本物理学会第 69 回年次大会
2014 年 3 月 27 日
東海大学(神奈川県・平塚市)

[図書](計 0件)

[その他]
ホームページ等
<http://ueda.iissp.u-tokyo.ac.jp/publications.html>

6. 研究組織

(1)研究代表者
上田 和夫 (UEDA, Kazuo)
首都大学東京・理工学研究科・教授
研究者番号: 70114395

(2)研究分担者
なし

(3)連携研究者
なし