

一次元 Ferromagnetic Kondo lattice model における金属絶縁体転移

東北大理 林哲也、倉本義夫

f 電子系化合物に見られる重い電子状態は、近藤効果が起源であることがよく知られている。一方、 LiV_2O_4 や YMn_2 など一部の遷移金属化合物においても重い電子的挙動が観測されているが、その起源については未だに議論が分かれている。f 電子系と同様に近藤効果が起源であるとする立場の他に、スピンのフラストレーションの効果が何らかの形で伝導電子に繰り込まれた結果発現するとする説もある。

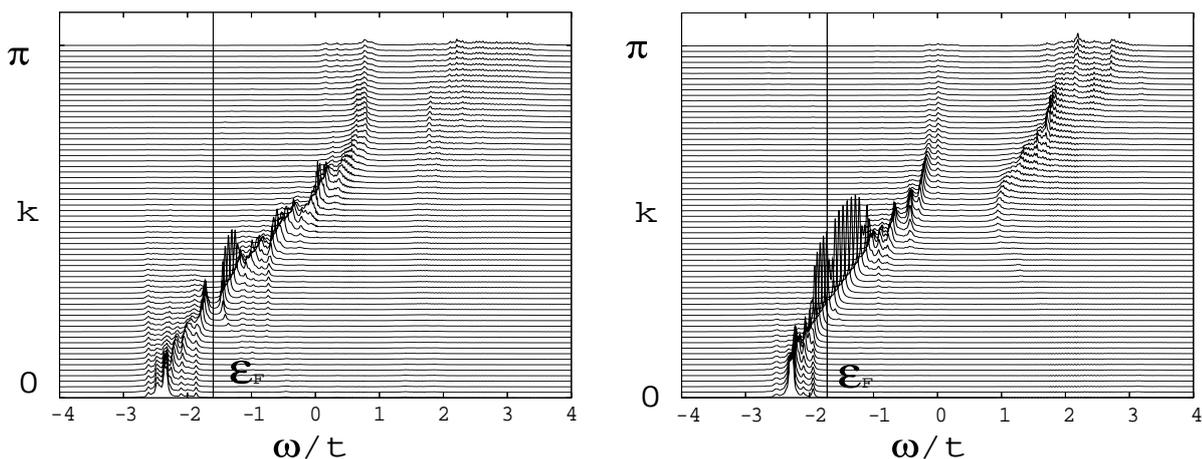
このような背景から、我々は反強磁性的な相関するスピンと結合した伝導電子の 1 粒子励起スペクトルを、短距離相関効果を考慮して理論的に調べた。最低限必要な自由度として、反強磁性相互作用する局在スピン、およびそれらとフント結合する伝導電子を取り入れた以下のようなモデルを考える。

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - I \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1)$$

ここで $\langle i, j \rangle$ は、最近接サイト間の和を表わしており、 I が伝導電子と局在スピン間のフント結合の強さ、 J が局在スピン間の反強磁性相互作用の強さを表わしている。この系を幾何学的フラストレーションのあるパイロクロア格子上で調べることが本題であるが、まず最も単純な系として 1 次元系をとり、 $1/4$ フィリングの系における 1 粒子励起スペクトルを詳しく調べた。計算にはクラスター摂動理論 [1] を用いた。この手法は、系を適当なサイズのクラスターに分割してクラスターの中で自己エネルギーを厳密に計算し、このクラスターの自己エネルギーを全系の自己エネルギーとする近似を行うものである。

フント結合 I を固定 (下に示した図は $I = 3.0t$) すると、反強磁性相互作用の強さ J が I に比べて小さい場合 ($J/I < 1/15$) には、フェルミ波数の位置 ($k_F = \pi/4$) にギャップが開く (左下図)。一方、局在スピン間の相互作用が強くなる ($J/I \geq 1/15$) と、 k_F でのギャップは閉じ、 $k = \pi/2$ に大きなギャップが開くという結果が得られた (右下図)。このモデルでは伝導電子間の最近接クーロン相互作用は取り入れていないので、 $1/4$ フィリングでフェルミ面にギャップがもたらされる機構は自明ではない。そこで、スピン相関関数も計算した。フント結合が強い ($J/I \ll 1$) 領域では $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ という 4 サイト周期の相関が見られ、逆に局在スピン間の反強磁性相互作用が強くなると、 $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ という 2 サイト周期に代わることがわかった。我々のスピン相関に関する結果は、過去の DMRG による計算結果 [2] とコンシステントである。上記の結果から、1 粒子励起スペクトルの $k_F = \pi/4$ に現れるギャップの原因は、 $2k_F$ のスピン相関の発達によるものであると考えられる。

今後の展望としては、これらの計算結果のサイズ依存性を詳しく調べることや、本題であるフラストレーションのある系で計算を行うことを考えている。



[1] D. Senechal *et al*: Phys. Rev. B **66** (2002) 075129

[2] D. J. Garcia *et al*: Phys. Rev. B **65** (2002) 134444