

## abstract

強相関電子系の物理、特に金属絶縁体転移に関する研究は長い歴史を持つ。単位胞あたりの電子数が奇数の場合に、電子相関が弱い系が金属であることはバンド理論およびフェルミ液体論によって非常によく説明される一方で、電子間のクーロン反発が強い系では電子が実空間で局在したモット絶縁体と呼ばれる状態になることが知られている。それらの間の金属絶縁体転移近傍では、電子の遍歴性と局在性の競合によって、摂動論などといった従来の理論では説明が難しい多彩な現象が現れる。また、モット絶縁体における磁性の研究は、局在スピン系の物理として研究が盛んに行われている。とりわけ格子構造に幾何学的フラストレーションが存在する系では、磁気秩序が抑制されることによって、新規な磁気状態の発現が期待されている。フラストレーションの効果は、モット絶縁体のような電子が強く局在した系のみならず、遍歴電子系においても電荷とスピンの自由度の強い結合を介した複雑な磁気秩序の発現や多量体形成などの多彩でエキゾチックな現象を引き起こす可能性がある。たとえば、電子相関とフラストレーションの両方を含む最も簡単なモデルの一つであるカゴメ格子上のハバードモデルでは、モット転移近傍の金属状態において、低温で電荷とスピンの自由度が凍結した後も、スピンの高次相関であるカイラリティ自由度のみが凍結せずに残留し、非従来型の重い電子的な振る舞いを引き起こすことが見出されている。また、電荷自由度が凍結していると考えられる強相関極限においても、摂動論による議論から、電荷自由度が局所円電流の形で現れ、スピンスカラーカイラリティと密接に関連していることが指摘されている。さらに、スピンの配置によって電荷密度に偏りが現れることも指摘されている。これらの結果は、フラストレーション格子上の強相関電子系では、電荷とスピンの絡み合った高次複合相関が、系の性質に本質的な影響をもたらすことを示唆している。

本研究では、こうした電荷とスピンの高次複合相関が系の性質にもたらす影響を調べることを目的として、カゴメ格子上のハバードモデルの磁場中における基底状態相図をハートリーフォック近似を用いて調べた。この近似の下で上記のような電荷とスピンの相関をあらわに調べるためには何らかの形で対称性を破る必要がある。そこで、本研究では外部磁場によるゼーマン効果と局所的な磁束の導入に対応する電子のホッピングの位相の効果を取り込んだ議論を行った。その結果、まず局所的な磁束の無い場合には、外部磁場によって、強相関領域でスピンの相対角が非等価ながら共面的な配置をとる Y 字型秩序相や 2:1 秩序相が誘起されることを見出した。これらの相ではスピンの磁場方向の成分が正である副格子サイトの電荷密度が大きくなり、一方で負となる副格子サイトの電荷密度が小さくなるという電荷密度の偏りが現れる。この電荷密度の偏りが、上記の摂動論から示唆される通りスピン相関と一定の関係を持っており、この関係式が強相関のみならずモット転移近傍の中間領域にわたる広いパラメタ範囲で成り立つことが分かった。また、この電荷密度の偏りが、モット転移近傍において特に増大することを見出した。これらの結果は、このモデルでは、外部磁場によって電気分極が発生するという交差相関的な振る舞いを示すこと、またその交差相関による分極はモット転移近傍で最も顕著に現れることを示唆している。一方、弱相関領域から中間領域にかけて、スカラーカイラリティが有限な値をとる non-coplanar (非共面的) な磁気秩序相が得られたが、大きな副格子を用いた計算ではその領域が小さくなることから、平均場解として安定に存在しない可能性が高い。また、局所的な磁束に対応したホッピング項の位相を取り入れた場合には、弱相関から強相関領域まで広い領域でスカラーカイラル絶縁相が現れ、Y 字相や 2:1 相も飲み込んで広く安定化することを見出した。さらにこの領域における局所円電流を計算した結果、強相関領域において、スカラーカイラリティと局所円電流の間

には上記の摂動論で得られた関係が成立することを確認した。また、モット転移に近づくにつれて、スカラーカイラリティはスピンモーメントの縮みを反映して摂動論の結果に比べて小さくなる一方、局所円電流は摂動論の結果にほぼ一致した振る舞いを示し続けることを見出した。