

フラストレートしたハバード模型における量子スピン液体の有限温度の性質について

三澤 貴宏（東大物性研）、山地洋平（東大物工）

量子スピン液体が有限温度でどのような性質を示すかは、実験的に量子スピン液体を同定する上で非常に重要な情報である。そこで我々は、量子スピン液体を基底状態にもつと期待されている、最近接のホッピング(t)と次近接のホッピング(t')を持つ正方格子上的ハバード模型(t - t' ハバード模型)に対して有限温度計算を行った。用いた手法は、近年提案された有限温度に対する厳密な計算手法である熱的純粋量子状態である[1]。 t - t' ハバード模型に対して系統的な計算を行った結果、 $t'/t \sim 0.75$ のパラメータ領域で、長距離のスピン相関が低温でも発達せず低温までエントロピーが残りつづけるという、量子スピン液体と整合する振る舞いを見つけた。また、最近接のホッピング t の 1/10 という比較的高温における残留エントロピーの値が、対象としている系が基底状態で量子スピン液体になれるかどうかを判定する基準として有用であることを見出した結果についても報告する。発表では、実験で量子スピン液体が報告されている[2]有機導体 $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ の第一原理有効模型[3]に対しても有限温度計算を行った結果についても発表する。本研究の計算の一部はオープンソフトウェア $\text{H}\Phi$ [4] を用いて行ったものである。

[1] S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **108**, 240401 (2012).

[2] T. Itou *et al.*, Phys. Rev. B **77**, 104413 (2008).

[3] K. Nakamura, Y. Yoshimoto, and M. Imada, Phys. Rev. B **86**, 205117 (2012).

[4] <https://github.com/QLMS/HPhi>.