

論文の内容の要旨

論文題目：格子上の電子系における乱れ及び相互作用の効果

氏名：大塚 雄一

1 序

電子間の相互作用が無視できない強相関電子系は磁性、高温超伝導、重い電子系などの多様で豊かな物理を内包しており、固体物理学の一大分野となっている。強相関電子系は本質的な多体問題であるため、理論的な取り扱いが簡単ではない。特に、銅酸化物高温超伝導との関連から興味を持たれる2次元以上の系では、有効な解析的手法は限られている。そのため、解析的手法と相補的に数値的手法が有効な研究方法となっている。本研究では原理的に近似を含まない数値手法である有限温度量子モンテカルロ法を用いて理論模型の研究を行った。

本研究で用いた有限温度量子モンテカルロ法はBlankenbecler(1981)らによって提唱された手法で、次元や模型の詳細にはあまり依存せず適用範囲が広い。強相関電子系では、相互作用によって電荷の揺らぎが強く抑制されることが本質的であり、有限温度量子モンテカルロ法はこの電荷揺らぎの効果が自然に取り入れられるという利点を持つ。対象としてはハバード模型とその派生物を中心に選び、有限温度の性質、特にモット転移近傍の電荷揺らぎと安定性という観点から研究を行った。

2 相互作用と乱れの競合効果

電子間相互作用と乱れ(系の不規則性)の効果は固体中の電子を考える上で共に重要な要因である。遷移金属酸化物などでは強い電子間相互作用により系は有限な電荷ギャップをもつ絶縁体に転移することが知られている。また、不純物等による乱れの効果は波動関数の局在を生じさせ、電荷ギャップを持たない絶縁相に転移する起因となる。本研究ではこれら二つの効果を対等に取り入れた理論模型に対し、原理的に近似のない数値的手法で研究を行った。

対象とした模型は次のハミルトニアンで記述されるランダムポテンシャルを含むハバード模型で次元は1次元から3次元まで調べた。

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i,\sigma} w_i \hat{n}_{i\sigma}$$

ここで、 $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ は電子の生成演算子、 t は電子の遷移積分、 U は電子間相互作用の強さである。乱れの効果は w_i を $[-W, W]$ の一様分布の中からランダムに選ぶことで取り入れた。電子濃度はハーフフィリングに固定したので、パラメータは相互作用の強さ U/t 、および乱れの強さ W/t の2つである。

乱れが存在しない場合、電荷圧縮率の温度依存性はモットギャップの存在を反映して熱活性型の温度依存性で、温度の低下にともない0に向かって減少する。この振舞いは乱れが弱ければ同様であり、電荷ギャップは減少はするものの、有限の値を持つことがわかる。一方、乱れが強い領域では温度の低下にとまなう圧縮率の減少傾向はなく、電荷ギャップが存在しないように見える。このことは、乱れによる非圧縮性相から圧縮性相への転移を示しており、その転移は有限の乱れの強さで起こることがわかった。さらに、磁気的性質をみるためにスピン構造因子を計算した。モット絶縁体に特徴的な強い反強磁性相関は乱れによって減少するが、その効果は一様ではない。乱れが弱い場合は反強磁性相関に与える影響は非常に小さく、これは電荷圧縮率の場合と同様である。また、乱れが強い領域では反強磁性相関はほとんど壊される。

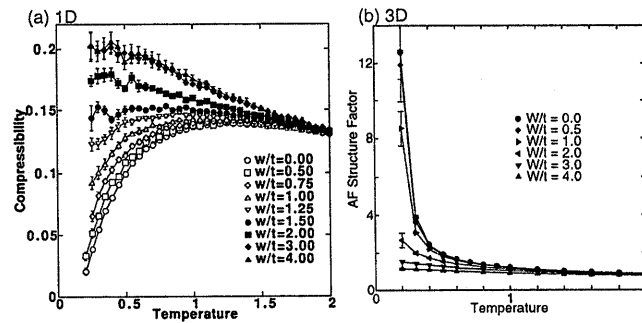


図 1: ランダムハバード模型の電荷圧縮率 (a) と反強磁性スピン構造因子 (b)

3 特異な状態密度を持つ系でのモット転移

近年、強相関電子系の可能な秩序相としてリンク上に秩序変数をもつ状態が注目されている。特に秩序変数が位相因子を持つ場合は、有効的には系に磁場が生じることとなる。このような状態はフラックス (磁束) 状態と呼ばれ、ハバード模型や $t-J$ 模型の平均場として議論されてきた。また、フラックス相は Laughlin らによる隠れた秩序相の指摘や 1次元拡張ハバード模型におけるボンドオーダー相の発見などの関連からも興味深い。本研究ではフラックス状態における電子間相互作用の効果を調べることを目的とした。フラックス状態は特異な状態密度を持つため、弱結合のモット転移におけるネステイングの議論が破綻する可能性がある。このような観点から、フラックス状態におけるモット転移の可能性、またモット転移が生じる場合にそれが通常のモット転移とどのような違いがあるかという点に注目した。

対象とした模型はフラックスを加えた 2次元ハバード模型である。フラックスの効果は遷移積分 t_{jk} に位相因子 θ_{jk} を $t_{jk}/|t_{jk}| = e^{i\theta_{jk}}$ と加えることで取り入れた。系のフィリングはハーフフィルドとし、この場合 Lieb の定理により π フラックス状態 ($\phi \equiv \sum_{\text{plaquette}} \theta_{jk} = \pi$) が最もエネルギー的に安定であることが知られているので、フラックスはこのように選んだ。なお、この模型では電子正孔対称性により量子モンテカルロ法で問題となる負符号は生じない。

相互作用の弱い領域ではフラックスのある場合とない場合で電荷圧縮率に大きな違いが見られる。このことはフラックス状態の特異なエネルギー構造が弱い相互作用に対して安定であることを示唆している。また、相互作用が強い領域ではフラックス状態の電荷圧縮率は通常ハバード模型と近く、ほぼモット絶縁体となっていることが分かる。また、磁気的性質についてはスピン構造因子の有限サイズスケールリングから弱結合領域では基底状態が反強磁性長距離秩序が存在しないことがわかった。一方、強結合領域では基底状態が反強磁性長距離秩序が存在し、これはフラックス状態では有限の相互作用の強さでモット転移が起こることを示唆している。このことは通常ハバード模型では無限小の相互作用の強さでモット転移が起こることと対照的である。

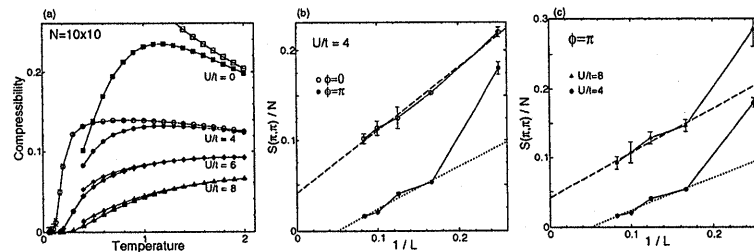


図 2: フラックス模型の電荷圧縮率 (a) と反強磁性スピン構造因子 (b,c)

4 相関効果によるフェルミ面の異方性

近年、強相関電子系に見られる特異な現象としてフェルミ面の異方的な性質が指摘されている。特に波数空間の $(\pi/2, \pi/2)$ と $(\pi, 0)$ で電子が異なる振る舞いを示すかどうかは、実験的には ARPES で観測される分散関係の特異な波数依存性やホールポケットの可能性という観点からも興味深い問題である。

本研究では二次元ハバード模型におけるフェルミ面近傍の電荷揺らぎを調べた。注目した物理量は波数分解能を持った電荷圧縮率、 $\kappa(\mathbf{k}) = d\langle n(\mathbf{k}) \rangle / d\mu$ である。ここで、 $\langle n(\mathbf{k}) \rangle$ は運動量分布関数、 μ は化学ポテンシャルを示している。有限温度では化学ポテンシャルの変化は電子数の変化すなわちドーピングをもたらす。従って、この量はハーフフィールドからわずかにドーピングを行った場合にキャリアが波数空間のどこに注入されるかを示す量である。

ハーフフィールドの場合を考えると相互作用 U/t が存在しなければフェルミ面は $|k_x| + |k_y| = \pi$ で与えられる四角形となり、このライン上は縮退している。従って $U/t = 0$ における $\kappa(\mathbf{k})$ はこのライン上で鋭いピークを持ち、なおかつその値は一定となる。この状態に相互作用を加えていくとこの縮退はほどけ、 $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ でピークを示すことがわかった。これは直接的には、この点での電荷揺らぎが $(\pi, 0)$ に比べて大きいことを示している。さらに、化学ポテンシャルの変化に対して電子の占有率が $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ で大きく変化することから、ホールポケットの存在と矛盾しない結果と言える。また、このピーク構造は温度の上昇にともない小さくなっていき、温度が相互作用の強さと同程度になったところで消失することがわかった。同じ量をいくつかの平均場を用いて計算したところ、 d 波ペアリングやスタグガードフラックス状態では同様なピーク構造が再現された。一方で、ネール状態を仮定した計算はフェルミ面上で一定の $\kappa(\mathbf{k})$ を与え、量子モンテカルロの結果とは一致しなかった。これは従来ハーフフィールドではネール状態が良い平均場であるとされていたことと対照的である。また、ハーフフィールドから十分に離れたオーバードープ領域では相互作用に関らず、明瞭なピーク構造は見られなかった。このことから、 $\kappa(\mathbf{k})$ に現れるピーク構造は相互作用が顕著になるモット転移近傍に特徴的な性格であると考えられる。

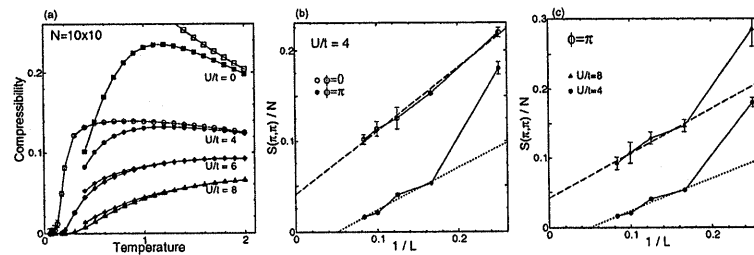


図 3: ハバード模型の電荷圧縮率の波数分布