

論文題目

Low-energy excitations in itinerant models with coexisting disorder and short-range interaction

(乱れと短距離相互作用が共存する遍歴模型の低エネルギー励起)

氏名 品岡 寛

金属絶縁体転移は物性物理学におけるもっとも基本的な問題の1つである。特に、その周辺で生じる多彩な現象との関連から、電子相関に駆動される金属絶縁体転移が近年注目を浴びている。強い電子相関を避けるため、電子が各原子軌道に1つずつ局在することで起きるモット絶縁体はその典型例である。一方、乱れも金属絶縁体転移を駆動することが知られている(アンダーソン転移)。アンダーソン転移は、乱れによって散乱された電子の波動関数が量子的に干渉し、空間的に局在した定在波を作ることで生じる。これら2つの絶縁体は、絶縁性という共通の性質を持つものの、定性的に異なる1粒子励起スペクトル(以下、状態密度)の低エネルギー構造を持つことが知られている。状態密度は、電気伝導度などに影響を与える基本的な物理量の1つである。つまり、電子相関に由来する絶縁体では有限の大きさのギャップを持つが、アンダーソン絶縁体ではギャップはなく、フェルミエネルギーにおいても状態密度は有限の大きさの値を持つ。

ところが、現実の物質では電子相関と乱れが常に共存している。特に、乱れの影響が強く電子相関由来のギャップ内に局在した不純物準位が誘起される場合、低エネルギーにおける1粒子励起構造が、単純なアンダーソン絶縁体として理解できるか否かは非自明な問題である。さらに、1粒子励起状態の低エネルギー構造は、光電子分光や電気伝導度の温度依存性として観測可能であり、実験においても重要な情報である。しかし、電子相関、乱れを同時に理論的に取り扱うことは難しく、現在まで統一的な理解は得られていない。

本博士論文では、電子相関と乱れの共存を記述するモデルの数値的解析、および、現象論の構築を組み合わせることで、電子相関と乱れの共存する絶縁体における低エネルギー1粒子励起密度を明らかにした。

本博士論文で解析したアンダーソン・ハバード模型は、短距離相互作用と乱れを含む最小模型の1つである。筆者は、まず3次元において、ハートリー・フォック近似の範囲内で基底状態の相図を求め、絶縁相全域(反強磁性絶縁相、常磁性絶縁相)においてソフトギャップが存在することを明らかにした。ソフトギャップとは、フェルミエネルギー上でのみ状態密度が0となるギャップ構造である。従来、EfrosとShklovskiiによって、長距離クーロン力が存在する場合には、アンダーソン絶縁相においてもフェルミエネルギー上で状態密度が有限にとどまることは許されず、ソフトギャップ(ソフトクー

ロンギャップ)が存在することが知られていた。しかし、アンダーソン・ハバード模型には、短距離相互作用しかなく、従来の理論では説明できない。そのため、3次元における数値計算の結果は、従来知られていないソフトギャップ形成のメカニズムの存在を示唆している。また、1次元、2次元においても、ハートリー・フォック近似の範囲内で、非従来型のソフトギャップ(ソフトハバードギャップ)が存在することを明らかにした。さらに、一次元において厳密対角化に基づく計算を行い、ソフトハバードギャップがハートリー・フォック近似を超えても形成されることを明らかにした。

ソフトハバードギャップの起源を明らかにするため、筆者は乱れのために基底状態が多くの励起状態と縮退していることを仮定し(多谷型エネルギー構造)、ソフトハバードギャップの形成を説明する現象理論を構築した。実際、現象論から予測される状態密度のエネルギーに対するスケーリング則が、数値的な計算結果と定性的かつ定量的に一致することを示した(表1を参照)。

現実の物質における電子間相互作用は、実際には長距離的である。そのため、低エネルギーにおいて長距離成分が支配的になるに従って、短距離相互作用に基づくスケーリング則から状態密度が逸脱することが期待される。短距離相互作用に対する現象論を拡張することで、長距離成分が支配的な低エネルギー領域においても、従来のEfros-Shklovskii理論が修正され、非従来型のスケーリング則がより低エネルギー領域で現れることを明らかにした。

状態密度は、電気伝導度の温度依存性を決めている。従って、非従来型のソフトギャップの存在下では、電気伝導度の温度依存性がやはり非従来型の関数に従うことが期待される。著者は、短距離相互作用が支配的な高温領域、相互作用の長距離成分が支配的な低温領域それぞれにおいて、多谷型エネルギー構造の存在下での電気伝導度の温度依存性を導いた。さらに、 $\text{SrRu}_{1-x}\text{TixO}_3$ の実験データと比較し、無矛盾であることを示した。

本博士論文は、乱れと電子相関の共存という普遍的な状況下における、非自明な低エネルギー励起構造の存在を明らかにするものである。状態密度は電気伝導の温度依存性に直接関係するだけでなく光電子分光など他の実験によっても観測可能な量である。従って、本博士論文は、理論面でさらなる研究を刺激するだけでなく、実験を理解する上で重要な役割を果たすことが期待される。

Model	Scaling of DOS	DC resistivity	Temperature
Clean Mott insulator	$= 0$ (hard gap)	$\exp(T_0/T)$	
Short-range interaction <i>without</i> multi-valley energy landscape	$\simeq A_0 > 0$	$\exp((T_0/T)^{1/(d+1)})$	
Short-range interaction <i>with</i> multi-valley energy landscape	$\exp(-\gamma(-\log \epsilon)^d)$	$\exp\left(c_0 \frac{\exp(-c_1 \log(k_B T) ^{1/d})}{k_B T}\right)$	
Long-range Coulomb interaction <i>without</i> multi-valley energy landscape	ϵ^{d-1} $\exp(-(\epsilon_0/\epsilon)^{1/2})$ (3D)	$\exp((T_0/T)^{1/2})$ $\exp((T_0/T)^{1/2})$	(HTs) (LTs)
Long-range Coulomb interaction <i>with</i> multi-valley energy landscape	ϵ^{d-1} $\exp(-\gamma(-\log \epsilon)^d)$ $\exp(-(\epsilon_0/\epsilon)^{1/2})$ (3D) $\exp(-\beta\epsilon^{-d})$	$\exp\left(c_0 \frac{\exp(-c_1 \log(k_B T) ^{1/d})}{k_B T}\right)$ $\exp((T_0/T)^{1/2})$ $\exp((T_0/T)^{1/2})$ $\exp\left(c_0 \frac{ \log(k_B T) ^{-1/d}}{k_B T}\right)$	(HTs) \downarrow \downarrow (LTs)

表1: 本博士論文で得られた状態密度のスケーリング則、および対応する抵抗率の温度依存性。影付きの部分が本論文で得られた新しいスケーリング則を示す。なお、HTs, LTsはそれぞれ高温、低温を表し、長距離クーロン力がある場合にはエネルギー・温度によるスケーリング則のクロスオーバーが起きる。