

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 品岡 寛

電子間の相互作用と系の乱れの効果がともに強い場合に、電子状態がどのような特徴を示すかというのは難問である。電子間相互作用の効果が付け加わると、それなしには単純な金属であった領域にモットハバード型の絶縁体が生じることがあり、また磁気秩序や電荷秩序などの対称性の破れた相も生じる。さらに金属相として残された領域でも電子相関の効果が顕著となり、通常のフェルミ液体とは異なるふるまいが現れる。一方、電子間相互作用なしで周期ポテンシャルの乱れの効果が加わると、アンダーソン局在による絶縁体が生じる。モットハバード絶縁体ではフェルミエネルギー付近の状態密度に有限なギャップが生じるが、アンダーソン絶縁体では局在長は有限であるものの状態密度は有限に残り、両者は顕著に異なる性質を示す。電子相関と乱れの効果がともに加わり、その効果が大きいときにどのような新しい様相が生まれるのか？ いくつかの萌芽的な研究はあるものの、また、現実の物質には相互作用と乱れの効果が必ず共存するにもかかわらず、物性物理学におけるこの根本問題の全貌は解明されていない。この問題で基礎となる大きな前進が 30 年ほど前に Efros と Shklovskii によってなされた。すなわち、クーロン相互作用の長距離部分の効果が加わると、励起状態に含まれる電子正孔励起間に生じる長距離引力のため、アンダーソン絶縁体であっても必然的に状態密度 D が $D \propto (E - E_F)^\alpha$ のようにフェルミエネルギー E_F に向かって冪的に減衰するようになる（ソフトギャップと呼ぶ）という理論的な証明である。この冪 $\alpha = d - 1$ は系の空間次元 d だけで決まっており、普遍的なものである。しかし実験的にはこの冪の予測と一致しない結果も見つかっており、理論的なコンセンサスも得られていない。

このような研究の背景のもとで、本論文は電子間相互作用と乱れが両方存在するときの電子状態の特徴を数値計算および現象論的理論によって考察し、Efros と Shklovskii にはじまる従来の理論に変更が必要であることを示し、新たな理論を提唱したものである。

本論文は、電子間相互作用と乱れの効果を研究するための理論模型として、アンダーソンハバード模型を採用し、これに対するハートリーフォック近似および厳密対角化を行なった数値計算による研究と、結果を理解するための現象論的考察、および関連する実験結果の考察からなり、英文で 6 章および 5 つの補遺からなる。

第 1 章では上に述べたような研究の背景、今までの実験的および理論的な研究がレビューされ、本研究の動機が述べられている。

第 2 章では本研究で採用したアンダーソンハバード模型、および数値研究手法として用いたサイト依存型ハートリーフォック近似とハミルトニアン of 厳密対角化手法が説明されている。

第 3 章は数値計算の結果を詳述したもので、本研究の主要成果の 1 つが述べられている。まずハートリーフォック近似による数値計算を行ない、クーロン相互作用が短距離であるアンダーソンハバード模型の相互作用と乱れの大きさをパラメタとするパラメタ空間での相図を求めた。この相図には常磁性金属相、反強磁性金属相、反強磁性絶縁体相、およびアンダーソン絶縁体相が相境界で互いに接しながら存在している。この相図を求めるにあたって、金属と絶縁体の間の転

移は波動関数の局在長の無限サイズへの外挿により決定し、常磁性と反強磁性の間の磁気転移はスピン相関関数から求めた構造因子のサイズ外挿から決定している。重要な結果はアンダーソン絶縁体相で、フェルミエネルギー上の状態密度がゼロになるソフトギャップが生じていることを、従来の計算を大きく上回る精度で疑いなく示した点である。Efros と Shklovskii の理論によれば、今回の理論模型で採用されているような短距離型の相互作用ではソフトギャップは生じないはずであるから、これは意外な結果である。さらに本章で述べられている 3 次元系での数値計算結果は、フェルミレベルに向かって、どのような冪よりも早く状態密度が減衰するという、このソフトギャップの顕著な特徴を明らかにした。この計算は空間次元 1, 2, 3 次元すべてに対して行なわれ、1 次元の場合だけは驚くべきことに、冪的に減衰するスケールリングでよくフィットできるソフトギャップになっていることも示した。本章ではさらにハートリーフォック近似の持つ平均場近似の限界を超える考察をするために、ハミルトニアンを厳密対角化による状態密度の計算も行なった。厳密対角化の場合には計算できるサイズが限定され、熱力学極限への外挿によるギャップのスケールリング形の決定は困難である。しかし少数系での結果はサイズの増大とともに状態密度が減少し、ソフトギャップの形成を強く示唆し、ハートリーフォック近似の結果を支持する結果となっている。

以上の数値計算結果に触発される形で、第 4 章ではソフトギャップの形成機構についての現象論的考察を行なっている。本論文のもうひとつの主要な成果が述べられている部分である。この現象論的な考察では、Efros と Shklovskii の理論では考慮されていなかった多体励起、特に多谷構造に由来する励起によって、短距離相互作用であってもフェルミレベル付近の状態密度が排除されて、ソフトギャップが生じるメカニズムを見出した。その結果 1 次元では冪的なソフトギャップ、2 次元以上ではどのような冪よりも早く減衰する特徴的なソフトギャップのスケールリング形を具体的に導き出すことに成功した。さらにこの理論を数値計算結果と比較した結果、計算結果をよく説明することを明らかにした。また、この現象論を敷衍することにより、クーロン長距離相互作用が存在する場合は、今回の結果よりもさらに早い減衰で特徴付けられるソフトギャップが生じることを示し、Efros と Shklovskii の理論に変更が必要であることを示した。

第 5 章では今回見出されたソフトギャップによって、電気伝導度の温度依存性の表式も導き、既存の実験データが矛盾なく説明できることを示した。今後の実験検証の可能性も指摘している。

第 6 章は全体のまとめと議論、今後の展望の考察にあてられている。

今回の博士論文の研究は、30 年来認められてきた Efros と Shklovskii の理論に変更を迫るものであり、学問的にきわめて基礎的な知見で凝縮系物理学の発展に寄与するものである。一方状態密度や電気伝導度といった基本的物理量の解析に新たな指針を与える点で物理工学および応用研究に与える示唆も大きい。

以上の成果について議論した結果、本論文審査委員会は全員一致で本研究が博士（工学）の学位論文として合格であると判定した。

なお本論文は指導教員今田正俊との共同研究の部分があるが、論文提出者が主体となった計算、解析において、論文提出者の寄与が、学位授与に当たって、十分であることが認められた。