

研究種目：若手研究 (B)  
 研究期間：2006～2008  
 課題番号：18740188  
 研究課題名 (和文) 空間相関を考慮した強相関理論の開発と金属絶縁体転移近傍の電子状態  
 研究課題名 (英文) Theory of strongly correlated electron systems with spatial fluctuations, and its application to metal-insulator transition  
 研究代表者  
 楠瀬 博明 (KUSUNOSE HIROAKI)  
 愛媛大学・大学院理工学研究科・准教授  
 研究者番号：00292201

研究成果の概要：動的平均場理論を基盤として、空間相関を考慮することのできる新しい強相関電子系の理論形式を定式化した。この理論を、強相関電子系の代表的な理論モデルであるハバード模型、アンダーソン格子模型、近藤格子模型に適用して、空間揺らぎの一粒励起スペクトルへの影響などを明らかにした。特に、金属相、絶縁相において、一粒励起スペクトルの形状が空間揺らぎによって大きく変化することを明らかにした。同時に、動的平均場理論の解法として、研究期間中に提唱された新しい量子モンテカルロ法を発展させた。この手法を近藤格子模型に適用して、従来数値的に困難であった極低温での 1 粒子スペクトルを精密に計算し、長年未解決であったフェルミ面の大きさに関する問題を解明した。

## 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,400,000	0	1,400,000
2007 年度	700,000	0	700,000
2008 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年			
度			
総計	2,600,000	150,000	2,750,000

研究分野：数物系科学  
 科研費の分科・細目：物理学・物性 II  
 キーワード：強相関系

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 電子相関に起因する金属絶縁体転移は、動的平均場理論の発展により、基礎的な部分が明らかになりつつある。しかし、電子のもつスピン自由度はサイト間距離に依存する磁気相関によって、そのエントロピーが解放されるため、空間相関を考慮した理論による議論が不可欠であった。

(2) 空間相関を取り入れた強相関理論は、小さなクラスターを用いた大規模数値計算が主流であるが、これでは短距離の相関は考慮できても、長距離の相関を無視する近似となり、磁気転移近傍で発達する長距離相関を取り込むことが出来ないという欠点があった。

## 2. 研究の目的

(1) 強相関系の特徴は、局所的な相関が強いことであるが、磁気転移や超伝導転移の近傍では長距離揺らぎが発達し、局所・非局所両方の相関が重要となる。従来の理論は長距離相関が考慮されておらずこの欠点を克服するような新しい理論的形式を開発する。

(2) 新しい理論形式を強相関電子系における代表的なモデルに適用し、一粒子励起スペクトルにおける長距離相関の影響、金属絶縁体転移に果たす役割を明らかにする。

(3) 近似の有効範囲を動的スペクトルおよび熱力学量を用いて多角的に検証する。また、いくつかの代表的モデルにおける類似点、相違点を明らかにする。

(4) 空間相関を考慮したとき、1体の物理量および2体の物理量に関して成り立つ和則がどの程度満たされているか、定量的に調べる。

(5) 金属絶縁体転移近傍で大きく変化する二重占有率が、空間相関を考慮した際に受ける影響を定量的に考察する。

## 3. 研究の方法

(1) 1体および2体の相関関数に成り立つ厳密な関係式を変形して、局所的な寄与と非局所的な寄与に分解する。局所的な寄与を局所相関を厳密に扱うことの出来る動的平均場理論を用いて記述する。また、局所的な電荷および磁気揺らぎスペクトルを動的平均場理論から構築し、局所的なバーテックス関数の情報を取り出す。バーテックスから非局所的な揺らぎを構成する。格子構造の空間的な特徴は、既約相関関数に取り込むことが出来る。これらの点を有機的に結合し、空間相関を自己エネルギーに取り込むための理論形式を定式化する。

(2) 強相関電子系の最も単純かつ本質的な二次元ハバードモデルに上記理論を適用し、数値計算の精度や誤差の大きいパラメータ領域、近似の有効範囲を確認しながら計算コードの開発を行う。特に、帯磁率などの動的スペクトルの低エネルギー領域の精度、比熱、二重占有率などの物理量の系統的なパラメータ依存性などを確認しながら開発を進める。

(3) 二次元ハバードモデル、アンダーソン格子モデル、近藤格子モデルなどの代表的なモデルに関して、温度、パラメータに関する相関の概容を決定する。また、電子フィリング、斥力の大きさ、バンド構造（特にネスティングの程度）と相関との相関を調べる。これらを通じて、パラメータ空間における金属絶縁体転移の境界や重い電子系の磁気秩序と電子状態との関係などの全体像を把握する。

(4) 金属絶縁体転移近傍の電子状態を詳細に調べ、空間相関の効果を明らかにする。特に、一粒子励起、二重占有率と磁気転移境界からの距離との関係を調べる。また、飛び移り積分を変化させて反強磁性ネスティングをコントロールし、それが電子状態へどのような影響を与えるか調べる。

(5) アンダーソン格子モデルにおける磁気秩序と近藤効果の競合について調べる。具体的には、混成強度によって磁気秩序の発生をコントロールし、磁気転移近傍で発達する長距離反強磁性揺らぎの効果

が電子スペクトルや二重占有率、重い電子の有効質量に与える影響を調べる。まず、ハーフフィルドで電子・ホール対称性がある場合について調べ、次にホールをドープして、重い電子状態における非局所相関の影響を調べる。

#### 4. 研究成果

(1) 動的平均場理論を拡張する形で、長距離の揺らぎを自己エネルギーに反映させる新しい強相関電子系の理論形式を定式化した。新しい理論形式は、空間相関を短距離相関に限らず全ての波数を系統的に取り込むことが出来るため、従来のクラスター動的平均場理論に比べて長距離相関の効果が重要となる状況で、より有効である。磁気転移近傍や超伝導の引力機構を考察する際、重要になるものと思われる。副産物として、その成果を簡潔に提示するため、小規模の数値計算で大まかな結果を求めることの出来る改良型反復摂動法も同時に改良した。これらの成果を論文にまとめ、国内外の研究集会で成果発表を行った。

(2) 上記の理論を強相関電子系の代表モデルである二次元ハバードモデルに適用し、ハバードモデルの一粒子励起において、磁気転移点近傍で金属領域には擬ギャップが生じること、絶縁体領域ではギャップエッジが鋭いピーク構造を持つことなどを明らかにした。数値計算の結果、転移点近傍において、比熱は発散的な増大を示し、長距離揺らぎが熱力学量に大きく寄与することを明らかにした。その他、二重占有率は動的平均場の結果とは対照的に転移点に向かって減少し、長距離相関の効果が、電子の局在化すなわち絶縁化に重要な役割を果たしていることを明らかにした。

(3) 本研究遂行中に、動的平均場理論の不純物問題に新しい解法が考案された。この手法をただちにアンダーソンモデルに適用して、極低温での動力学を議論した。同時に、電荷揺らぎが抑制された状況を記述する近藤格子モデルに適用できるように数値計算技法と定式化を拡張した。この拡張によって、自由度の多い系でも現実的な計算時間で精度良く計算が行えるようになった。この点は、現実の物質がもつ個性を取り入れた多自由度の複雑な

モデルを扱う際に重要となる。交換型モデルに対する新しい量子モンテカルロ法は、強相関系の不純物問題の解法として現在もっとも優れており、今後、その有効性が世界的に広まっていくものと思われる。

(4) 上記(3)の成果をもとに、近藤格子モデルの相図を極低温まで精密に決定した。近藤格子モデルでは、金属を特徴づけるフェルミ面に囲まれる体積に局在した電子が寄与するかどうかという原理的に重要な問題があり、20年のほど未解決のままであった。新しい計算手法のもつ非常に高い精度と極低温まで適用可能な利点を生かし、近藤格子モデルを詳細に調べた。とくに、フェルミ面の体積と電子分散との関係を温度の関数として詳細に調べることで、この論争に終止符を打った。すなわち、高温での電子状態は局在電子を含まない小さなフェルミ面で特徴づけられる。温度の低下とともにフェルミ準位の近傍に混成ギャップに起因する擬ギャップが形成され、分散関係が急激に変化する。この結果、低温で局在電子も含めた大きなフェルミ面が形成される。この結果は、近藤格子モデルの本質を端的かつ明瞭に記述している。この点の理解が進んだことで、物質の個性を取り入れた今後の研究において重要な指針が得られるものと考えられる。

(5) アンダーソン格子モデルに関しても、本研究において定式化した空間相関を考慮した新しい手法を適用し、Doniachが提唱した定性的な相図が正しいことを示した。また、繰り込まれた混成バンド絶縁体においても、長距離磁気相関効果によってバンドギャップ端の状態密度が鋭い構造をもつことを明らかにした。二重占有率に関する定性的な傾向もハバードモデルと類似することが分かった。

(6) 1粒子および2粒子のスペクトルが満たすべき総和則について定量的に調べた。動的平均場近似では1粒子および2粒子ともに総和則を満たすが、空間相関を考慮すると2体スペクトルの総和則が破れる。しかし、破れの程度は2-3%程度であり、実用上問題とならない。また、全体の計算を自己無撞着に行うことで、この点が改善されるものと思われる。

(7) 本研究で開発した手法の中核をなす磁気および電荷の空間揺らぎを用いると、動的平均場理論では議論できなかった異方的な超伝導の転移温度について、強相

関係におけるエネルギースケールの栗込みを考慮した形で、微視的に議論できることを明らかにし、その定式化を行った。この理論を実際に適用して、超伝導の問題を議論することは今後の課題である。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 12 件)

- ① J. Otsuki, H. Kusunose, Y. Kuramoto, Evolution of a large Fermi surface in the Kondo lattice, Phys. Rev. Lett., 102, 017202-1-4 (2009), 有
- ② H. Kusunose, Description of Multipole in f-Electron Systems, J. Phys. Soc. Jpn., 77, 064710-1-18 (2008), 有
- ③ J. Otsuki, H. Kusunose, Y. Kuramoto, Continuous-Time Quantum Monte Carlo Method for the Coqblin-Schrieffer Model, J. Phys. Soc. Jpn., 76, 114707-1-11 (2007), 有
- ④ J. Otsuki, H. Kusunose, Y. Kuramoto, The de Haas-van Alphen effect in Kondo systems with crystalline electric field, J. Magn. Magn. Mater., 310, 425-426 (2007), 有
- ⑤ H. Kusunose, Effect of antiferromagnetic correlation to single-particle excitations in strongly correlated electron systems, J. Phys. Conf. Series., 150, 042105-1-4 (2006), 有
- ⑥ H. Kusunose, Influence of Spatial Correlations in Strongly Correlated Electron Systems: Extension to Dynamical Mean Field Approximation, J. Phys. Soc. Jpn., 75, 054713-1-9 (2006), 有

[学会発表] (計 16 件)

- ① H. Kusunose, Effect of antiferromagnetic correlation to

single-particle excitations in strongly correlated electron systems, The 25th Low Temperature Physics, 2008, Aug. 7-13, Amsterdam

② H. Kusunose, Microscopic Theory for Higher-Rank Multipole Orders, JPS meeting, 2008 Mar. 23-26, Osaka

③ H. Kusunose, Extension of Dynamical Mean-Field Theory: Inclusion of Spatial Fluctuations, New Quantum Phenomena in Skutterudite and Related Systems, 2007 Sep. 26-30, Kobe

④ H. Kusunose, Extension to DMFT with spatial correlations, and low-energy electronic excitations, JPS meeting, 2006 Sep. 23-26, Chiba

⑤ H. Kusunose, Extended Dynamical Mean-Field Approximation and its application to strongly correlated electron systems, The 4th workshop for Skutterudite, 2006 Jun. 1-3, Sendai

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者  
楠瀬 博明 (KUSUNOSE HIROAKI)  
愛媛大学・大学院理工学研究科・准教授  
研究者番号: 00292201

(2) 研究分担者  
なし

(3) 連携研究者  
なし