

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 5 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540428

研究課題名(和文) モット転移近傍における電子状態の研究

研究課題名(英文) Research on electronic states near the Mott transition

研究代表者

河野 昌仙 (Kohno, Masanori)

独立行政法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・MANA研究者

研究者番号：40370308

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文)：銅酸化物高温超伝導体の金属-絶縁体転移(モット転移)近傍では、様々な異常な電子状態の振る舞いが観測されており、それらは高温超伝導のメカニズムと密接に関連していると考えられている。本研究では、モット転移近傍の2次元系の数値シミュレーションを行い、2次元系のモット転移の主な特徴は1次元系の性質と同様に説明できることを明らかにした。また、このモット転移の描像から、銅酸化物高温超伝導体で観測されている様々な異常な振る舞いを統一的に説明することに成功した。

研究成果の概要(英文)：In cuprate high-temperature superconductors near the metal-insulator transition (Mott transition), various anomalous features of electronic states have been observed, which are considered to be intimately related to the mechanism of high-temperature superconductivity. In this study, by a numerical simulation for a two-dimensional system near the Mott transition, primary features of the Mott transition in a two-dimensional system were similarly explained as those of a one-dimensional system. In addition, from the viewpoint of the Mott transition, various anomalous features observed in cuprate high-temperature superconductors were successfully explained in a unified manner.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性

キーワード：モット転移 高温超伝導体 ハバードモデル クラスタ-摂動理論 擬ギャップ

1. 研究開始当初の背景

(1) 銅酸化物高温超伝導体では、電子状態に様々な異常な振る舞いが観測されており、その異常な振る舞いが高温超伝導のメカニズムと密接に関係していると考えられている。銅酸化物高温超伝導体は CuO_2 面で発現するため、高温超伝導のメカニズムを解明するには、2次元系のモット転移近傍の電子状態を正確に理解することが重要となる。しかしながら、モット転移近傍では強い電子相関が本質的な役割を果たすため、従来の自由電子の描像に基づく概念では理解することが困難であった。

(2) 1次元系と高次元系では低エネルギー極限の励起の特徴が異なるため、一般に、有限エネルギーの2次元系の性質も1次元系の性質をもとに解釈することはできないだろうと考えられていた。

2. 研究の目的

(1) 本研究では、2次元系のモット転移近傍の電子状態の特徴を明らかにし、高温超伝導体で観測されている様々な異常な振る舞いをモット転移の観点から統一的に説明することを目的とする。

(2) 高温超伝導体で異常な振る舞いが現れる比較的高いエネルギー領域に注目することにより、1次元系と高次元系の低エネルギー極限の励起の違いに関する問題を回避し、2次元系の特徴を1次元系の性質から連続的に変化したものとして解釈する。

3. 研究の方法

(1) 1次元ハバードモデルで得られたスペクトル関数 $A(k, \omega)$ の結果をもとにして、1次元系が弱く結合した2次元系の解析を行う。具体的には、1次元鎖間のホッピングに関して乱雑位相近似と呼ばれる近似を適用し、スペクトル強度の分布が、鎖間ホッピングの強度を強くするにつれて、1次元系のものからどのように変化するかを調べる。

(3) 2次元系の数値シミュレーションを行い、1次元系からの解析結果と比較することにより、1次元系と2次元系の特徴の対応関係を調べる。2次元系の数値シミュレーション方法としては、 4×4 サイトのクラスタのグリーン関数を数値的に厳密に計算し、それを用いたクラスタ摂動理論を適用する。

4. 研究成果

(1) モット転移とは、電子の動きをスピン自由度に残したまま、電荷自由度が凍結する転移であることを明らかにした。具体的には、モット転移に向けて1電子励起の低エネルギーの分散関係は、モット絶縁体のスピン励起の分散関係へと連続的に変化するが、下部ハバードバンドの電子を加える励起のスペ

クトル強度は徐々に消滅するというモット転移の特徴を、1次元系および2次元系の結果から導き出すことに成功した。この特徴は以下の結果から導かれた。

① モット転移直前の金属相の1電子励起の低エネルギーの分散関係は、1次元系の場合は、 $\omega \approx v_{1D} \cos k$ 、2次元系の場合は、 $(0, 0) - (\pi, \pi)$ 方向の波数 (k, k) で、 $\omega \approx \sqrt{2} v_{2D} \cos k$ と表すことができる。ここで、 v_{1D} と v_{2D} はそれぞれ1次元系と2次元系のモット絶縁体のスピン波の速さである。このことは、モット絶縁体のスピン波励起の分散関係が、1次元系と2次元系の $(0, 0) - (\pi, \pi)$ 方向で、それぞれ、 $\omega \approx v_{1D} |\sin k|$ 、 $\omega \approx \sqrt{2} v_{2D} |\sin k|$ と表されることから、モット絶縁体直前の金属相の1電子低エネルギー励起の分散関係はモット絶縁体のスピン波励起と直接関係することを示している。

② モット絶縁体に近づくにつれて、下部ハバードバンドの電子を加える励起 ($\omega > 0$ の領域) のスペクトル強度は徐々に減少し、モット転移点でゼロになる。このことは、①の結果を考え合わせると、電子の動きをスピン自由度に残したまま、電荷の自由度が凍結すると解釈することができる。

③ この特徴は、1次元系でも2次元系でも同様に現れることから、モット転移の一般の特徴と考えられる。

(2) 2次元系のモット転移近傍の数値シミュレーション結果を、高温超伝導体の実験結果と比較することにより、高温超伝導体で観測されている様々な異常な振る舞いは、単純な2次元系のモット転移近傍の性質として、統一的に説明できることを明らかにした。そして、1次元系の描像を拡張することによって、高温超伝導体の異常な振る舞いに対して明快な解釈を与えることができた。具体的には、以下の振る舞いを説明した (図1)。

① スピノン由来の励起とホロン由来の励起
1次元鎖間に弱いホッピングを導入することにより、鎖間ホッピングのフーリエ変換が正になる波数領域では高い ω 側に、負になる波数領域では低い ω 側に、1次元系のスペクトル強度分布がシフトする。このことから、2次元系の負の ω 領域で現れる2つのモードをそれぞれ1次元系のスピノンに由来するものと、ホロンに由来するものと同定することができる。このような振る舞いは、銅酸化物高温超伝導体の実験でも観測されている。

② 分散関係のキंकとウォーターフォール
①の解析によって、低エネルギー励起を特徴づけるスピノン由来の励起から、比較的高エネルギーの励起を特徴づけるホロン由来の励起へと、スペクトル強度の主ピークが移り

変わる場所があることがわかった。この点は高温超伝導体で観測されている高エネルギーの巨大なキंकに対応している。また、キंकの下方に小さなスペクトル強度をもつ急峻なモードが現れることは、高温超伝導体で観測されているウォーターフォールと呼ばれている振る舞いに対応する。

③ ドーピング誘起状態

下部ハバードバンドの ω が正の領域に、モット転移の直前でも有限の分散関係をもつモードが存在することが2次元系の数値シミュレーションによってわかった。このモードは、①と同様な1次元系からの解析により、1次元系においてスピノンと反ホロンの連続スペクトルの上端に位置するモードが、連続的に変化したものとして同定することができる。実際、1次元系でも2次元系でも、このモードは、モット転移に向けて連続的にスペクトル強度を失い、分散関係はモット絶縁体のスピン波励起のものに帰着する。このモードは、高温超伝導体で観測されているドーピング誘起状態またはギャップ内状態と呼ばれているものに対応する。

④ 平坦バンド

波数 $(\pi, 0)$ 付近では、大きなスペクトル強度をもつ平坦なモードが $\omega=0$ の少し下に現れる。この波数領域の性質は、主にこのモードによって特徴づけられる。高温超伝導体でも、この波数領域に平坦なモードが観測されている。

⑤ 擬ギャップ

④の平坦なモードは大きなスペクトル強度をもつため、このモードの ω 位置に状態密度 $A(\omega)$ は主要なピークをもつことがわかった。また、モット転移近傍において、このピークと化学ポテンシャルとのエネルギー差を擬ギャップのエネルギーと定義すると、この擬ギャップの大きさは、反強磁性的揺らぎのスケール $J(=4t^2/U)$ に比例することがわかった。ここで、 U はハバードモデルのオンサイト斥力の強さで、 t はホッピングの強さである。

⑥ フェルミアーク

④の平坦なモードが $\omega < 0$ に位置することから、波数 $(0, 0) - (\pi, 0)$ 方向には、 $\omega=0$ を横切るモードは存在しない。波数 $(\pi, 0) - (\pi, \pi)$ 方向には、 $\omega=0$ を横切るモードが存在するが、そのモードは、③で述べたモット転移に向けてスペクトル強度を失うモードなので、モット転移近傍では、波数 $(\pi, 0) - (\pi, \pi)$ 方向の $\omega \approx 0$ のスペクトル強度は小さくなる。このことから、モット転移近傍では、 $\omega \approx 0$ には波数 $(\pi/2, \pi/2)$ 付近にだけ強いスペクトル強度が残る(図1下図)。この振る舞いは、高温超伝導体で観測されているフェルミアークの振る舞いに対応する。

① ホールポケット

$\omega < 0$ の領域に広がる連続スペクトルは、波数 $(\pi/2, \pi/2)$ 付近に上端を持つ。その上端は、 $\omega > 0$ の領域にはみ出しており、①と同様な1次元系からの議論により、1次元系の反ホロンに由来するものであることがわかった。反ホロンのモードは、2つのギャップレス点をもち、ギャップレス点で挟まれた波数領域をホールポケットと見なすことができる。2次元系でも、1次元系の反ホロンに由来するモードが存在することから、そのモードと $\omega=0$ との交線で囲まれた波数領域をホールポケットと見なすことができる。高温超伝導体では、量子振動などの実験で観測されている小さなフェルミ面が対応する可能性がある。

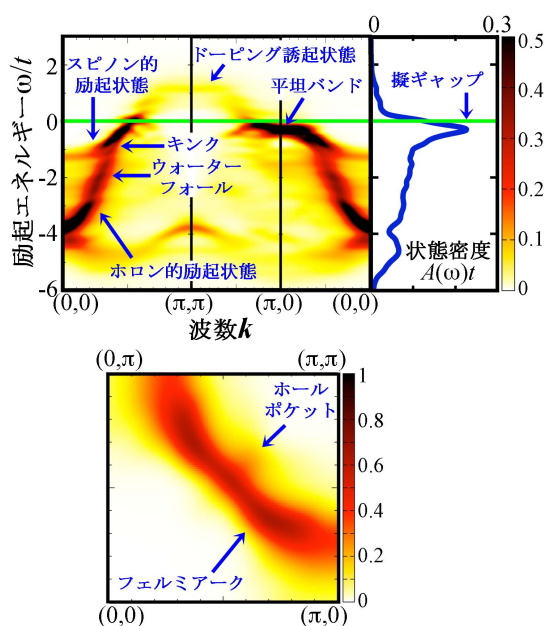


図1 2次元ハバードモデルのモット転移近傍の1電子励起のスペクトル強度 $A(\mathbf{k}, \omega)t$ の分布。上図の縦軸は励起エネルギー ω ($\omega > 0$ では電子を加える励起の励起エネルギー、 $\omega < 0$ では電子を取り除く励起の励起エネルギーに負号をつけたもの)をホッピングの強さ $t (> 0)$ で割ったものを示し、横軸は波数 \mathbf{k} を示す。上図の右パネルは1電子励起の状態密度 $A(\omega)t$ を示す。下図は $\omega \approx 0$ のスペクトル強度の分布を示す。M. Kohno, “Mott transition in the two-dimensional Hubbard model”, *Physical Review Letters*, **108**, 076401 (2012)より転載。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 3 件)

- ① S. Uji, K. Kodama, K. Sugii, Y. Takahide, T. Terashima, N. Kurita, S. Tsuchiya, M. Kohno, M. Kimata, K. Yamamoto, and K. Yakushi, “Kosterlitz-Thouless-Type Transition in a Charge Ordered State of the Layered Organic Conductor α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ ”, *Physical Review*

Letters, **110**, 196602 (2013), DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.196602, 査読有り.

- ② Masanori Kohno, “Mott transition in the two-dimensional Hubbard model”, *Physical Review Letters*, **108**, 076401 (2012), DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.076401, 査読有り.
- ③ Masanori Kohno, “Relation between high-energy quasiparticles of quasi-one-dimensional antiferromagnets in a magnetic field and a doublon of a Hubbard chain”, *Journal of Physics: Conference Series*, **320**, 012021 (2011), DOI: 10.1088/1742-6596/320/1/012021, 査読有り.

[学会発表] (計 19 件)

- ① 河野昌仙, “非アーベル動的密度行列繰り込み群法とクラスター摂動理論を用いた2次元 t - J モデルのモット転移の研究”, *日本物理学会 2014 年年次大会*, 講演番号: 27pAD-12, 東海大学, 平塚, 日本 (2014 年 3 月 27 日).
- ② Masanori Kohno, “Nature of the Mott transition in the one- and two-dimensional Hubbard models”, *APS March meeting 2014*, No. G47.10, Denver, アメリカ (2014 年 3 月 4 日).
- ③ 河野昌仙, “2次元 t - J モデルのモット転移近傍の性質”, *日本物理学会 2013 年秋季大会*, 講演番号: 26aEA-9, 徳島大学, 徳島, 日本 (2013 年 9 月 26 日).
- ④ Masanori Kohno, “Relationship between single-particle excitation and spin excitation at the Mott Transition”, *International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2013*, 講演番号: A_651, 東京大学, 東京, 日本 (2013 年 8 月 8 日).
- ⑤ Masanori Kohno, “Nature of the Mott transition in the one- and two-dimensional Hubbard models”, *Bad Metal Behavior and Mott Quantum Criticality Workshop*, 浦項工科大学, 浦項, 韓国 (2013 年 7 月 18 日).
- ⑥ 河野昌仙, “電子ドーパ系の擬ギャップ”, *日本物理学会 2013 年年次大会*, 講演番号: 27pXJ-5, 広島大学, 広島, 日本 (2013 年 3 月 27 日).
- ⑦ Masanori Kohno, “Spectral properties near the Mott transition in the two-dimensional Hubbard model”, *APS March meeting 2013*, No. M35.8, Baltimore, アメリカ (2013 年 3 月 20 日).
- ⑧ 河野昌仙, “2次元ハバードモデルの擬ギャップ”, *日本物理学会 2012 年秋季大会*, 講演番号: 21aGB-13, 横浜国立大学, 横浜, 日本 (2012 年 9 月 13 日).
- ⑨ Masanori Kohno, “Relationship between single-particle excitation and spin excitation at the Mott transition”, *International Conference on Magnetism 2012*, No. 898, Busan Exhibition Convention Center, 釜山, 韓国 (2012 年 7 月 12 日).
- ⑩ Masanori Kohno, “Quasiparticles of quasi-one-dimensional antiferromagnets in a magnetic field”, *IES Lecture Series*, 浦項工科大学, 浦項, 韓国 (2012 年 4 月 19 日).
- ⑪ Masanori Kohno, “Spinons and triplons in anisotropic triangular antiferromagnets”, *IES Lecture Series*, 浦項工科大学, 浦項, 韓国 (2012 年 4 月 18 日).
- ⑫ Masanori Kohno, “Mott transition in one- and two-dimensional Hubbard models”, *IES Lecture Series*, 浦項工科大学, 浦項, 韓国 (2012 年 4 月 17 日).
- ⑬ 河野昌仙, “モット転移における1粒子励起と磁気励起との関係”, *日本物理学会 第67回年年次大会*, 講演番号: 24pYH-5, 関西学院大学, 西宮, 日本 (2012 年 3 月 24 日).
- ⑭ Masanori Kohno, “String solutions and Mott physics in quasi-one-dimensional antiferromagnets”, *APS March meeting 2012*, No. B13.13, Boston, アメリカ (2012 年 2 月 27 日).
- ⑮ 河野昌仙, “空間的異方性をもつスピン $1/2$ 三角格子反強磁性体における励起”, *G-COE & 極限量子科学研究センタージョイントセミナー*, 大阪大学, 豊中, 日本 (2011 年 12 月 15 日).

- ⑯ 河野昌仙, “ストリング解とモットの物理”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 講演番号: 21aGA-5, 富山大学, 富山, 日本 (2011 年 9 月 21 日).
- ⑰ 河野昌仙, “歪んだ三角格子反強磁性体の磁気励起”, 第 40 回化合物新磁性材料研究会, 東京理科大学, 東京, 日本 (2011 年 9 月 9 日).
- ⑱ Masanori Kohno, “Origin of high-energy magnetic excitations in anisotropic triangular antiferromagnets in a magnetic field: relation to Mott physics”, *MEXT/CIFAR workshop on frustrated magnetic and other systems*, Coast Plaza Hotel,バンクーバー, カナダ (2011 年 5 月 31 日).
- ⑲ 河野昌仙, “異方的 2 次元フラストレート磁性体の有限温度の性質”, 特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」平成 22 年度立ち上げ全体会議, 理化学研究所, 和光, 日本 (2011 年 5 月 11 日).

[図書] (計 1 件)

- ① 河野昌仙, “モット転移解析と高温超伝導体の電子状態”, *超伝導現象と高温超伝導体*, NTS, 第 3 編, 第 1 章, 第 3 節, 417 (2013).

[その他]

河野昌仙のホームページ

http://www.nims.go.jp/mana/members/personal/m_kohno/Japanese/menu/mhome.htm

6. 研究組織

(1) 研究代表者

河野 昌仙 (KOHNO, Masanori)
物質・材料研究機構・国際ナノアーキテク
トニクス研究拠点・MANA 研究者
研究者番号: 40370308