

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 8 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25400359

研究課題名(和文) 強相関電子系の伝導現象における臨界性の理論

研究課題名(英文) Theory of criticality in transport phenomena in strongly correlated electron systems

研究代表者

常次 宏一 (Tsunetsugu, Hirokazu)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号：80197748

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：反強磁性秩序発現に伴う金属絶縁体転移近傍の光学電気伝導度をクラスター動的平均場法に基づく大規模数値計算で求め、相互作用による電流が繰り込みを与える頂点補正が光学伝導度の周波数依存性、温度依存性に大きな影響を与えることを発見した。また、フラストレートした強相関電子系のモット金属絶縁体転移の特徴の解明を目指して、最近接サイト間の電荷揺らぎの量子ダイナミクスを同手法を用いて計算し、特にdoublonとholonと呼ばれる伝導電子の二重占有状態と空状態が強い引力的相関を持つことを明らかにした。

研究成果の概要(英文)：We have investigated optical conductivity near a metal-insulator transition associated with antiferromagnetic ordering using large-scale numerical simulations based the cluster dynamical mean field theory. We have discovered important contributions of vertex corrections in temperature and frequency dependence of conductivity. To investigate the nature of Mott metal-insulator transition in strongly correlated electron systems with frustration, we have also studied quantum dynamics of charge fluctuations between nearest-neighbor sites using the same approach. We have found that there are strong attractive correlations between a doublon and a holon, which are doubly-occupied and empty configuration of electrons at each atomic site.

研究分野：物性理論

キーワード：動的相関関数 モット転移 光学伝導度 強相関電子系 反強磁性秩序 動的平均場法 熱伝導度

1. 研究開始当初の背景

(1) モット絶縁体を中心として、金属絶縁体転移を特徴付ける臨界指数の決定に注目が集まり、電気伝導度の実験データのスケールリング解析からモット転移の普遍クラスを決定するという試みが注目を集めていた。これらの研究においては、電気伝導度が相転移の秩序変数に対応するものとして解析が行われているが、電気伝導度は熱力学量ではないためこの仮定の妥当性は明らかではなく、伝導度の直接的な計算による検証が必要であった。

(2) モット転移と磁気秩序を伴う金属絶縁体転移を比較して、電気伝導度の冪乗則が共に成立しているか、冪の値が同一であるべきかという問題についての理論的な知見がほとんどなかった。

(3) 低次元的反強磁性体においてスピン自由度に由来する熱伝導度が非常に大きいという実験結果が報告されており、その大きさの起源について注目が集まっていた。1次元量子スピン系において、固有状態が厳密に求まる可積分模型の場合には有限温度で輸送係数が発散することがあることが理論的に示されていたが、一般の次元において熱伝導と磁気揺らぎの関係は、マグノン励起のボルツマン理論を超える理論はほとんど知られていなかった。

2. 研究の目的

強相関電子系の電気伝導と熱伝導に関する数値的理論的研究を行い、輸送現象の特徴を解明する。特に金属絶縁体転移における電気伝導の臨界性と磁気揺らぎの影響、スピン系の熱伝導の臨界性の2点を中心として研究を行う。

3. 研究の方法

金属絶縁体転移近傍の電気伝導についてはハバード模型を対象として研究する。モット転移に対しては三角格子、磁気秩序を伴う金属絶縁体転移としては正方格子を用いてその上のハバード模型を考察し、電子密度はともにサイト当たり電子1個のhalf fillingに固定する。

強相関効果と短距離のスピン量子揺らぎおよび熱揺らぎの両方を取り入れるためにクラスター動的平均場法を用いて、大規模数値計算によりクラスター内の1電子グリーン関数を自己無撞着に決定する。電子相関効果による電流のずれを与える頂点補正を計算するために、同じ方法で2電子グリーン関数を計算する。これらのグリーン関数を計算する解法としては、クーロン斥力が強い極限から出発した電子hoppingに関する摂動展開に基づく連続時間量子モンテカル口法を採用する。

スピン系の熱伝導については、最も簡単な2次元イジング模型を対象とし、Creutzによって提案されたマイクロカノニカル法(デー

モン法)を用いて熱伝導度を計算する。

4. 研究成果

(1) モット金属絶縁体転移の本質を明らかにし、光学伝導度の特徴の解析に関係するdoublonとholonの量子ダイナミクスを研究した。原子サイトを電子が二重占有する配置とそれと相補的な空の配置はdoublonとholonという粒子によって記述される。モット転移の熱力学量の特異性はdoublon密度を秩序変数とするイジング普遍性クラスによって特徴づけられることが知られている。したがって転移点における輸送係数の特異性にはdoublonやholonの量子ダイナミクスが関係する。この問題をhalf fillingの三角格子ハバード模型のクラスター動的平均場法に基づく数値計算により研究した。最近接サイト間の電子のhopping積分を $t=1$ としてエネルギーの単位とする。温度は $T=0.08$ に固定し、クーロン斥力の値として金属側では $U=8$ 、絶縁体側では $U=10.5$ の値を用いて両者の結果を比較する。

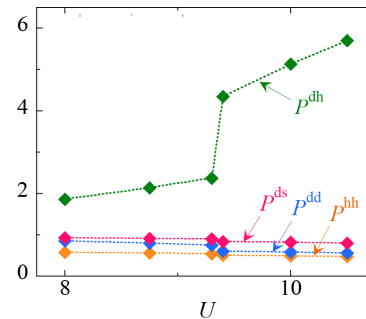


図1 三角格子ハバード模型のdoublonとholonの相関

図1は温度を固定して、クーロン斥力を変化させた時の最近接サイト間のdoublon-holonの相関 $P^{dh}$ と他の組み合わせの相関値の比較である。doublon-holonの相関としては、両者が同時に存在する確率をdoublonとholonの密度の積で規格化したもので、1よりも大きい値が引力的相関となっていることを表している。他の組み合わせについても同様の定義をする。モット転移が起こるのは $U_c=9.4$ 付近であるが、絶縁体側でdoublon-holonの引力的相関が他の組み合わせと比較して顕著に増大していることがわかる。

図2は最近接サイト間のdoublon-holon, doublon同士, holon同士の動的相関関数の時間依存性である。 $U=10.5$ の絶縁体相においてはいずれも $t \sim 2$ より長時間ではほぼ完全に減衰している。一方 $U=8.0$ の金属相においては動的相関関数の長時間の振る舞いが非常に異なり、 $t \sim 50-60$ まで大きな揺らぎが続いておりこれが金属相において大きな伝導度の原因となっていることがわかる。

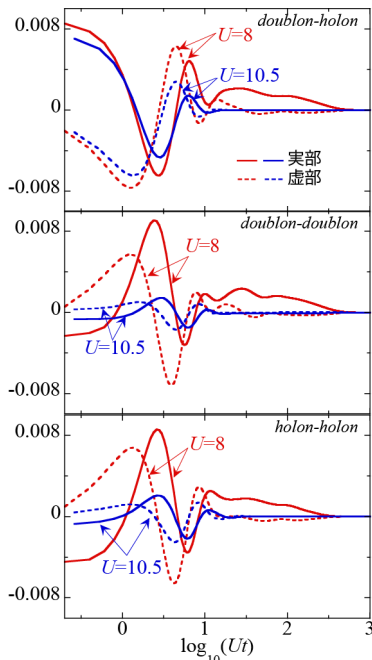


図2 三角格子ハバード模型における最近接サイト間の動的相関関数

(2) 前項と同様に三角格子ハバード模型の最近接サイト間の動的相関関数の短時間の振る舞いのより詳しい解析を行った。doublon-holonとdoublon同士の動的相関関数の値を複素平面上で時間経過と共に描かれる軌跡として解析した。その結果2つの特徴が明らかとなった。まず、短時間の振る舞いを特徴づける時間スケールとして、軌跡が $t=0$ から出発して位相が回転するのに要する時間を採用することが自然であることがわかった。その時間スケールはいずれの相関関数についてもおよそ $1/U \sim 0.3$ である。2つめの特徴としては、短時間の動的相関の振る舞いはdoublon-holonとdoublon同士で異なっており、doublon-holonでは $t=0$ での初期値が大きく時間と共に複素平面上で $t$ の収束点の周囲を回りながら減衰していくのに対して、doublon同士では初期値が小さく時間経過とともにdoublonが形成され $t \sim 0.3$ で最大となった後、減衰していくことがわかり、これらのモット転移近傍の電荷揺らぎの量子ダイナミクスの重要な知見が得られた。

(3) 反強磁性相における光学伝導度の計算のため、電子間相互作用による電流のずれの寄与を表す頂点補正を表す表式を求めた。

(4) half-fillingの正方格子ハバード模型のクラスター動的平均場法に基づく数値計算を実行し、反強磁性相転移近傍の光学伝導度を研究した。反強磁性相が絶縁体相である。この計算は実際には正方格子が積層した準2次元系に対応している。電子の最近接サイト間hoppingを $t=1$ としてエネルギー単位とし、クーロン斥力は $U=6.5$ に固定する。この時の反強磁性転移温度は $T_N=0.34$ であり、この温

度近傍において計算を実行した。

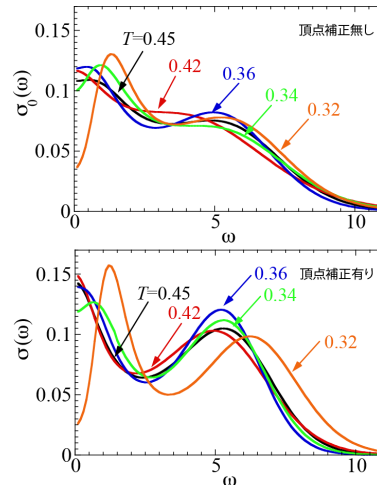


図3 正方格子ハバード模型の光学伝導度

上図は頂点補正を入れた場合と入れなかった場合の光学伝導度の周波数依存性である。最も重要な結果として、頂点補正により光学伝導度の値がかなり大きな変更を受けるといことであり、これは以前の研究で調べた三角格子の結果と大きく異なる。三角格子の場合には頂点補正の寄与は非常に小さかった。この差は、反強磁性転移点で発散する磁気揺らぎが大きな波数依存性をもっており、その効果が頂点補正に現れているものと考えられる。

この点を確認するために頂点補正の詳しい解析を行った。まず、反強磁性秩序相においては、1電子グリーン関数にスピンに依存する成分が出現する。頂点補正の中でスピン依存グリーン関数を含む磁気的な部分が大きな寄与を持つことが明らかになった。

さらに頂点補正の中で電流を構成している準粒子particleとholeの1つの対を異なる相対運動量をもつ対に散乱する効果を表す頂点関数の運動量依存性を解析した。具体的には、入射する電流の準粒子particleの運動量が $(\pi/2, \pi/2)$ と $(\pi, 0)$ の2つの場合の比較を行った。この2つの運動量は、half-filled正方格子ハバード模型の $U=0$ のフェルミ面上にあり、準粒子の寿命が特に長いcoldスポットと特に短いhotスポットに対応している。計算結果は2つの場合に、準粒子対の散乱の頂点関数の運動量依存性が大きくことなることを示しており、正方格子ハバード模型の場合に電子間相互作用の効果が伝導度に大きく影響する理由が明らかになった。

さらに、実験的検証がより容易な直流電気伝導度にも頂点補正の効果が特徴的に現れることを見出した。

図4に示した計算結果は反強磁性転移温度 $T_N=0.34$ より高温の $T=0.40$ 付近から伝導度が温度の低下とともに減少する絶縁体的振る舞いを示している。

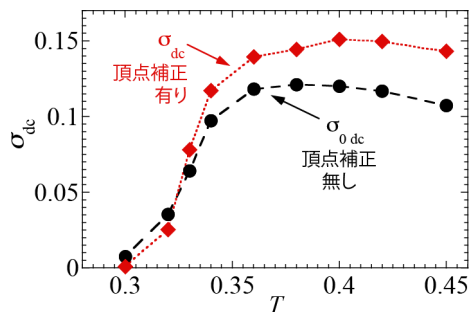


図4 正方格子ハバード模型の直流電気伝導度の温度依存性

この振る舞いは、いわゆる擬ギャップ機構で現れる温度依存性と類似しているが、今回の計算では1電子スペクトルのフェルミ面における擬ギャップや光学伝導度におけるドルーデピークの有限周波数へのシフトはおこっておらず、両物理量とも典型的な金属相の振る舞いを示している。この振る舞いを示す温度領域は頂点補正を取り入れることによって大幅に拡大しており、頂点補正による効果であることが結論できる。この点は実験結果を解釈する際に考慮に入れるべきポイントとして重要である。

(この部分の研究成果は論文投稿中。T. Sato and H. Tsunetsugu, "A CDMFT study of antiferromagnetic transition in the square-lattice Hubbard model: optical conductivity and electronic structure", arXiv: 1605.00387)

(5) デモン法を用いた2次元イジング模型の熱伝導度を計算するプログラムを完成させ、熱伝導度の温度依存性を調べた。同じプログラムにより内部エネルギーを計算することが可能で、そのデータの温度微分から求めた比熱の結果は知られている特異性とconsistentな結果を与えた。一方で計算したシステムサイズの範囲内においては、熱伝導度は発散的な振る舞いを示さなかった。この結果は比熱と熱伝導度の関係についてさらなる考察が必要であることを示しているのと同時に、比較のために熱伝導度の新計算法が必要であることを明らかにした。

## 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 2 件)

Toshihiro Sato and Hirokazu Tsunetsugu, "Dynamical Characteristics of the Mott transition: Examination of Doublon Dynamics in a Triangular-lattice Hubbard model", Physics Procedia, 査読あり、vol.75, 2015, 376-382

Toshihiro Sato and Hirokazu Tsunetsugu, "Doublon dynamics of the Hubbard

model on a triangular lattice", Physical Review B, 査読あり、vol.90, 2015, 115114/1-4

[学会発表](計 6 件)

佐藤年裕, 「強相関電子系の電気伝導における磁気揺らぎの影響」, 2015年9月16日、関西大学(大阪府吹田市)

Toshihiro Sato, "Dynamical Characteristics of the Mott Transition: Examination of Doublon Dynamics in a Triangular-lattice Hubbard Model", 20<sup>th</sup> International Conference on Magnetism (ICM2015), 2015年7月10日、バルセロナ(スペイン)

佐藤年裕, 「正方格子ハバード模型における磁気日本物理学会」, 2015年3月23日、早稲田大学(東京都新宿区)

Hirokazu Tsunetsugu, "Doublon-holon dynamics and transport near the Mott transition", Quantum Spin Dynamics: From Exotic Excitations to Novel Transport and Non-Equilibrium Phenomena, 2014年9月8日、ドレスデン(ドイツ)

Toshihiro Sato, "Dynamic change at the Mott transition: examination of doublon dynamics in a triangular-lattice Hubbard model", The ISSP International Workshop "New Horizon of Strongly Correlated Physics", 2014年6月18日、東京大学物性研究所(千葉県柏市)

Hirokazu Tsunetsugu, "New quantum order of magnets - spin nematic state", LOTHERM Workshop "Advances in Quantum Magnets - Dynamics", 2013年9月9日、Kolymbari(ギリシャ)

[その他]

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

常次 宏一 (TSUNETUGU, Hirokazu)  
東京大学・物性研究所・教授  
研究者番号: 80197748

### (2) 研究分担者

佐藤 年裕 (SATO, Toshihiro)  
国立開発法人理化学研究所・その他部局等・研究員  
研究者番号: 70648683

### (3) 連携研究者

服部 一匡 (HATTORI, Kazumasa)  
首都大学東京・理工学研究科・准教授  
研究者番号: 30456199