OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Theoretical Study of Metal-Insulator Transition and Antiferromagnetism in Hubbard Model on Honeycomb Lattice
Author(s)	Ueda, Tomoya
Citation	大阪大学, 2011, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/1048
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【25】

氏名	上田倫也（うえだともや）
博士の専攻分野の名称	博士（理学）
学位記番号	第　24320　号
学位授与年月日	平成23年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科物理学専攻
学位論文名	Theoretical Study of Metal-Insulator Transition and Antiferromagnetism in Hubbard Model on Honeycomb Lattice （ハニカム格子上ハバード模型に於ける金属-絶縁体転移と反強磁性の理論的研究）
論文審査委員	（主査） 教授　小川　哲生 （副査） 教授　赤井　久純　　教授　阿久津泰弘　　教授　菊池　誠 准教授　浅野　建一

論文内容の要旨

強相関電子系の分野に於いて、強い電子相関によって引き起こされる金属‐絶縁体転移であるモット転移は最も精力的に研究されている課題のひとつである。空間次元が3次元以上の系で起こるモット転移については良く理解されているが、2次元系に於けるモット転移については多くの未解明な問題が残されている。例えば、三角格子系などの幾何学的フラストレーションを持つ系におけるモット絶縁相では、新奇な量子相であるスピン液体状態と呼ばれる非磁性絶縁相が実現することが予想されている。また、ハニカム格子系に関しては、対応する物質は未だ発見されていないものの、グラフェンの電子相関効果との関連から、最近非常に活発な研究が行われるようになっている。さらに、高次元系のモット転移の理解に重要な役割を果たした動的平均場理論は、様々に拡張されて2次元系に適用され、銅酸化物などの高温超伝導体の記述が試みられている。

本博士論文に於いては、まず、動的平均場理論を拡張した2つのクラスタ動的平均場理論である、セル型動的平均場理論及び動的クラスタ近似を基盤として、新たな理論的枠組みである線形化セル型動的平均場理論及び線形化動的クラスタ近似を提案した。これらの手法に於いては、自己エネルギーを低エネルギー展開に基づいて線形化し、さらに有効場を少数に限定するという近似を行う。これらの手法は通常は大規模な数値計算を要するクラスタ動的平均場理論を非常に簡単化し、系統的な研究を可能とする。さらに特筆すべき点として、自己エネルギーが線形化されることから、準粒子の分散関係に関して半解析的な表式が得られ、数値計算による誤差の問題が生じないという利点が挙げられる。次近接の飛び移り積分を考慮した正方格子上ハバード模型に対してこれらの手法を適用することにより、その妥当性を確認した。この模型は次近接の飛び移り積分に由来する幾何学的フラストレーションを含んでおり、取り扱いが非常に困難な模型であると考えられている。線形化動的クラスタ近似を用いて得られた結果は、先行して行われていた経路積分繰り込み群法と呼ばれる大規模な数値計算によって得られた結果と驚くべき一致をみた。これは、本手法の妥当性を示す重要な結果である。

次に、線形化動的クラスタ近似をハニカム格子上ハバード模型へと適用し、モット転移と反強磁性転移について調べた。先行研究によって、非磁性半金属相と反強磁性絶縁相の間に非磁性絶縁相が出現することが示唆されていたが、本研究によって、その存在が確定的なものとなった。特に、先行研究と異なる点として、無限小の電子間相互作用によって微小なギャップが開き絶縁相へと転移するという結果を得た。この微小なギャップの存在は先行研究では数値計算の誤差として見落とされていたと考えられ、本博士論文に於いて初めて指摘されたものである。

論文審査の結果の要旨

モット型金属-絶縁体転移は，電子相関に関する分野において最も活発に研究されている課題の一つである。高次元系におけるモット転移は良く理解されているが，二次元系におけるモット転移は，いまだに未解明な問題が多く残されている。三角格子系におけるモット絶縁体においては，幾何学的フラストレーションに起因して，スピン液体相等の新奇量子相の実現が示唆されており，この研究分野におけるホットトピックスとなっている。ハニカム格子系に関しては，直接の対応物質が発見されていないものの，グラフェンにおける相互作用効果と関連して，ごく最近になって急速に研究が進んでいる。理論的側面としては，高次元系におけるモット転移の理解に大きな進展を与えた動的平均場理論が拡張され，最近，銅酸化物高温超伝導体を中心とした二次元系に適用されている。

本博士論文では，動的平均場理論を拡張した2種類のクラスタ動的平均場理論，セル型動的平均場理論および動的クラスタ近似の枠組みを用いて，二次元ハバード模型におけるモット転移と反強磁性転移が研究された。解析の際に，自己エネルギーの低エネルギー展開に基づく線形近似を用いた新しいクラスタ動的平均場理論が構築されたことは重要である。これらの手法は，線形化セル型動的平均場理論および線形化動的クラスタ近似と名付けられ，通常膨大な数値計算を必要とするクラスタ動的平均場理論を簡単化し，系統的な研究を可能とした。また，準粒子分散等に関して半解析的な表式が与えられ，数値計算誤差による曖昧さを排除した点もこの方法の長所の一つとなっている。

線形近似された方法は，先ず，次近接ホッピングが考慮された正方格子ハバード模型に適用され，その妥当性が検証された。この模型は幾何学的フラストレーションを含んでおり，相互作用効果の取り扱いが難しい模型と考えられている。線形化動的クラスタ近似によりモット転移に関する相図が計算され，先行して行われていた大規模数値計算，経路積分繰り込み群法による結果と非常に良く一致する結果が得られた。簡単化された方法

によって，取り扱いの難しいフラストレート系における大規模数値計算の結果が再現された点は驚くべきことであり，また，この近似の妥当性を実証する重要な結果となっている。次に，ハニカム格子ハバード模型におけるモット転移と反強磁性転移が調べられた。先行する理論研究により，反強磁性相と非磁性半金属相との間に新奇なスピン液体相が存在することが示唆されていたが，線形化動的クラスタ近似の計算により，このスピン液体相の存在がより確定的なものとなった。さらに，先行研究の結果と異なる点として，無限小の相互作用により微小なエネルギーギャップが開き，絶縁体（スピン液体）となることが示唆された。この微小なエネルギーギャップは，先行する量子モンテカルロ法による計算では，数値計算誤差として見落とされていたと考えられ，本博士論文によって初めて指摘されたものである。

以上のように，本博士論文は電子相関に関する研究分野に重要な知見を与え，また構築された理論体系は，今後，本研究分野の様々な問題に応用される可能性を秘めている。よって，本論文は博士（理学）の学位論文として十分価値あるものと認める。