



Title	軌道自由度を有する強相関電子系における量子相転移の理論的研究
Author(s)	稲葉, 謙介
Citation	大阪大学, 2008, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/48738
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

氏 名 ^{いな}稲 ^ば葉 ^{けん}謙 ^{すけ}介

博士の専攻分野の名称 博 士 (工 学)

学 位 記 番 号 第 2 2 0 0 6 号

学 位 授 与 年 月 日 平成 20 年 3 月 25 日

学 位 授 与 の 要 件 学位規則第 4 条第 1 項該当

工学研究科精密科学・応用物理学専攻

学 位 論 文 名 軌道自由度を有する強相関電子系における量子相転移の理論的研究

論 文 審 査 委 員 (主査)

准教授 菅 誠一郎

(副査)

招へい教授 川上 則雄 教 授 笠井 秀明 教 授 萩行 正憲
京都大学基礎物理学研究所教授 遠山 貴己

論 文 内 容 の 要 旨

軌道自由度を持つ強相関電子系は、物性物理の中で最もアクティブな研究分野の一つである。最近、 $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ 及び、 $\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ において軌道に依存したモット転移が生じることが指摘され、話題になっている。この軌道依存モット転移は、既存のモット転移の概念を覆す新しい概念である上、軌道自由度を持つ系の普遍的性質であることが期待されるため、実験・理論両面から盛んに研究が行われている。このような背景の下、本論文では、軌道自由度を持つ強相関電子系におけるモット転移に注目して解析を行った。始めに、軌道縮退がモット転移に与える影響について議論した。次に、軌道依存モット転移に焦点をあて、有限温度における軌道依存モット転移の性質を調べた。更に、系の基底状態を系統的に解析し、軌道自由度を有する系のモット転移の性質を詳細に議論した。

第 1 章では、研究背景について紹介した後、本論文の目的について述べた。

第 2 章では、本論文で用いた自己エネルギー汎関数法について述べた。

第 3 章では、多軌道ハバード模型を取り上げ、軌道縮退によって誘起される軌道揺らぎがモット転移にどのような影響を与えるかを調べた。その結果、軌道縮退はモット転移に対して定性的には変化を与えないが、定量的に大きな影響を与えることが分かった。

第 4 章では、近年モット転移の新たな概念として提案され注目を集めている軌道依存モット転移に関して解析を行った。比熱などの熱力学量に軌道依存モット転移を特徴付ける振る舞いが現れることを明らかにした。また、軌道依存モット転移の有限温度の相図を決定した。

第 5 章では、軌道自由度を有する系のモット転移の性質を明らかにするために、絶対零度における 2 軌道ハバード模型の基底状態の性質を、パラメータを系統的に変化させて詳細に調べた。その結果、これまでコンセンサスを得られていなかったモット転移の回数に関する 2 つの問題が、金属相の軌道揺らぎを考慮すれば統一的に理解できる事を明らかにした。

第 6 章では、更に、任意のバンドフィリングにおいて生じるモット転移について解析を行った。その結果、軌道依存モット絶縁相が、ホールドープ領域に大きく広がり、バンドフィリングの変化に対して安定に存在することを明らかにした。

最後に第 7 章において本論文を総括し、今後の展望について述べた。

論文審査の結果の要旨

軌道自由度を持つ強相関電子系は、物性物理の中で最もアクティブな研究分野の一つである。最近、 $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ 及び、 $\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ において軌道に依存したモット転移が生じることが指摘され、注目を集めている。この軌道依存モット転移は、未解決の問題を数多く含むにも関わらず、軌道自由度を持つ系の普遍的性質であることが期待されるため、実験・理論両面から盛んに研究が行われている。このような背景の下、本論文では、軌道自由度を持つ強相関電子系におけるモット転移に注目して解析を行っている。始めに、軌道縮退がモット転移に与える影響について議論している。次に、有限温度における軌道依存モット転移の性質を調べている。更に、系の基底状態を系統的に解析し、軌道自由度を有する系のモット転移の性質を詳細に議論している。その成果は、以下の4点にまとめられる。

- (1) 多軌道ハバード模型を取り上げ、軌道縮退によって誘起される軌道揺らぎがモット転移にどのような影響を与えるかを調べている。その結果、軌道縮退はモット転移に対して定性的には変化を与えないが、定量的に大きな影響を与えることを明らかにしている。
- (2) 比熱などの熱力学量に軌道依存モット転移を特徴付ける振る舞いが現れることを明らかにしている。また、軌道依存モット転移の有限温度での相図を決定している。
- (3) 軌道自由度を有する系のモット転移の性質を明らかにするために、絶対零度における2軌道ハバード模型の基底状態の性質を、パラメータを系統的に変化させて詳細に調べている。その結果、これまでコンセンサスが得られていなかったモット転移の次数に関する2つの問題が、金属相の軌道揺らぎを考慮すれば統一的に理解できる事を明らかにしている。
- (4) 任意のバンドフィリングにおいて生じるモット転移について解析を行っている。その結果、軌道依存モット絶縁相はホールドープ領域に大きく広がり、バンドフィリングの変化に対して安定に存在することを明らかにしている。

以上のように、本論文は軌道自由度を有する強相関電子系における量子相転移と臨界点近傍の物性に関して理論的に研究したもので、基礎的な面のみならず応用の面でも有益な知見を得ており、応用物理学、特に物性物理学に寄与するところが多い。よって本論文は、博士論文として価値あるものと認める。