



Title	強相関電子系における軌道揺らぎ及び非局所揺らぎの効果
Author(s)	北, 優子
Citation	大阪大学, 2010, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/57511
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	北倫子
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第23792号
学位授与年月日	平成22年3月23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	強相関電子系における軌道揺らぎ及び非局所揺らぎの効果
論文審査委員	(主査) 教授 民谷栄一 (副査) 招聘教授 菅誠一郎 准教授 影島賢巳 教授 萩行正憲 准教授 浅野建一(理学研究科)

論文内容の要旨

強相関電子系の研究が急速に発展する中で、電子の持つ多軌道自由度に起因した多彩な物性に注目が集まっている。最近新しく発見された高温超伝導体である鉄を含む化合物においては、超伝導発現のメカニズムに、鉄d電子の持つ軌道自由度の効果が大きく寄与していることが認識されている。また、遷移金属化合物 $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ における軌道依存モット転移は、多軌道強相関電子系を理解する上で重要な基礎的概念の一つであると考えられている。また、この物質は、d電子系でありながら重い電子的振る舞いも観測されていることから、希土類化合物などf電子系との関連も、解明すべきテーマとして興味が持たれている。

このような背景の下に、本論文では軌道自由度を持つ強相関電子系の理論的研究を行った。特に、モット転移近傍の振る舞いに注目し、これまで重きを置いて解析してきた局所的な相関効果に加えて、非局所的な揺らぎの効果について議論を行った。非局所的な揺らぎの効果は、波数に依存した物理量や、磁気・軌道秩序において、しばしば重要な寄与を与える。近年の実験技術の急速な進歩により、角度分解光電子分光等の分解能が向上し、小さなエネルギースケールでフェルミ面や状態密度を調べられるようになった。また、軌道秩序等を直接観測する手法も発達している。そのため、多軌道強相関電子系において非局所的な揺らぎの効果まで取り入れた解析の重要性は、今後ますます高まるものと考えられる。

論文中では、まず第1章において、上述のような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、本論文を通して用いた理論的解析手法であるクラスター動的平均場理論について説明した。

第3章と第4章では、多軌道強相関電子系を記述するミニマムな模型として二軌道ハーバード模型を取り上げ、特にクオーターフィリングにおけるモット転移近傍のスピinn・軌道揺らぎについて解析した。フント結合が強くなると、強磁性・反強軌道揺らぎが強められることによって、系に絶縁体的な振る舞いがもたらされることが分かった。これに対して、二つの軌道間のバンド幅の違いが大きくなると、反強磁性・強軌道揺らぎが支配的になり、絶縁体的な振る舞いが現れることが分かった。一方で、両者が競合する領域では、基底状態に競合が存在するフラストレーション効果によって、低温まで特定のスピinn・軌道に関する相関が発達せず、フェルミ液体的な準粒子状態が安定化されていることを明らかにした。

最後に第5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

強相関電子系の研究が急速に発展する中で、電子の持つ多軌道自由度に起因した多彩な物性に注目が集まっている。最近発見された鉄系高温超伝導体においては、超伝導発現のメカニズムに、鉄d電子の持つ軌道自由度の効果が大きく寄与していることが認識されている。また、遷移金属化合物 $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ における軌道依存モット転移は、多軌道強相関電子系を理解する上で重要な基礎的概念の一つであると考えられている。このような背景の下に、本論文では軌道自由度を持つ強相関電子系の理論的研究を行っている。特に、モット転移近傍の振る舞いに注目し、これまで重きを置いて解析されてきた局所的な相関効果に加えて、非局所的な揺らぎの効果について議論を行っている。非局所的な揺らぎの効果は、波数に依存した物理量や、磁気・軌道秩序において、しばしば重要な寄与を与える。近年の実験技術の急速な進歩により、軌道秩序等を直接観測する手法も発達している。そのため、多軌道強相関電子系において非局所的な揺らぎの効果まで取り入れた解析の重要性は、今後ますます高まるものと考えられる。

第1章では、上述のような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ている。

第2章では、非局所揺らぎの効果を取り扱う理論的解析手法であるクラスタ動的平均場理論について説明し、多軌道強相関電子系への適用について詳説している。

第3章では、多軌道強相関電子系を記述するミニマムな模型として二軌道ハバード模型を取り上げ、クォーターフィリングにおけるモット転移近傍のスピン・軌道揺らぎについて、特にフント結合の効果に注目して解析している。フント結合が無い場合には、フェルミ液体的な準粒子状態が形成されることを見出している。この振る舞いは、単一軌道模型においては見られないことから、軌道揺らぎの効果によるものであることが示されている。また、フント結合が強くなると、フェルミ液体的な準粒子状態は破綻し、ギャップ構造を持つ絶縁体的な振る舞いが現れることを明らかにしている。この振る舞いは、フント結合によって強められた強磁性・反強軌道揺らぎに起因しており、非局所揺らぎが系のダイナミクスに大きく影響を及ぼしていることを示している。

第4章では、二軌道間のバンド幅の違いの効果について調べている。バンド幅の違いが大きくなると、反強磁性・強軌道揺らぎが支配的になり、絶縁体的な振る舞いが現れることを見出している。一方で、バンド幅の違いが中間的な領域ではフント結合の効果とバンド幅の違いの効果が競合するため、フラストレーション効果によって低温まで特定のスピン・軌道に関する相関が発達せず、フェルミ液体的な準粒子状態が安定化されていることを明らかにしている。このフラストレーション効果による重い準粒子状態の形成は、幾何学的フラストレーションを持つ系においても指摘されているため、基底状態に競合を持つ遍歴強相関電子系に普遍的な特徴的性質である可能性を指摘している。

第5章では本論文を総括し、今後の展望について述べている。

以上のように、本論文は強相関電子系における軌道揺らぎ及び非局所揺らぎの効果について理論的研究を行い、多軌道自由度や多量子変数を持つ相関電子系の統一的理解に貢献し得る有益な知見を得ており、応用物理学、特に物性物理学の基礎研究の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は、博士論文として価値あるものと認める。