

2軌道 Hubbard モデルにおける、スピン密度波状態に誘起され た金属-絶縁体転移

小西 英史

概要

磁性有機導体 λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ の実験において確認されている温度相図を理論的に説明する描像を得るために、絶対零度におけるモデルを考案し研究した。この相図に関わる当該物質の基本的な性質として、次の4つが挙げられる。(1) on-site Coulomb 相互作用 U による強相関電子系である。(2) ハーフフィリングの系である。(3) Fermi 面近傍においては2つのバンドにより記述でき、Fermi 面にはネスティングが完全に近いものと不完全なものの2つが共存する。(4) 低い転移温度 $T_{\text{MI}} \sim 8.3$ [K] 以上では常磁性金属であり、転移温度 T_{MI} 以下では反強磁性絶縁体である。当該物質を単純化したモデルとして、2次元正方格子上で、最隣接ユニットセル間及び第2最隣接ユニットセル間のホッピング t, t' と on-site Coulomb 相互作用 U とを取り入れた、ハーフフィリングの2軌道 (バンド) t - t' - U Hubbard モデルに、更に両軌道間の交換相互作用を取り入れたモデルを考案した。このモデルにおいて、Fermi 面のネスティングが良い軌道 A と Fermi 面のネスティングが悪い軌道 B とを仮定した。各軌道のネスティングの完全性は、 t' の値を調節することにより決めた。このモデルの基底状態において、on-site Coulomb エネルギー U と伝導バンド幅 W との比率 U/W を上げることにより、まず軌道 A の基底状態においてスピン密度波状態による反強磁性秩序が生成したときに、軌道 A - B 間の交換相互作用から、もう一方の軌道 B の基底状態にスピン密度波状態が誘起され、金属-絶縁体転移が誘発される機構を確立した。尚、軌道 A の解析の際には、on-site Coulomb 相互作用についてスピン密度波平均場理論を用い、軌道 B の解析の際には、S. Florens と A. Georges により提案されたスレーブ・ローターの方法を用いた。この絶対零度において得られた金属-絶縁体転移の描像を用いて、 λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ の温度相図を定性的に説明するシナリオを提示した。

目次

第 1 章 序論	7
1.1 磁性有機導体 λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$	7
1.1.1 電荷移動錯体	7
1.1.2 Fermi 面と相図	8
1.1.3 反強磁性秩序の起源としての伝導 π 電子の SDW 状態	9
1.2 Mott 絶縁体転移	11
1.3 モデルの概要	13
1.4 本論文の構成	13
第 2 章 Hubbard モデルにおける反強磁性秩序状態	15
2.1 Spin Density Wave (SDW) 状態	15
2.2 On-site Coulomb 相互作用の Hartree-Fock 近似	16
2.2.1 一般の隣接サイト間のホッピングの場合	16
2.2.2 最隣接サイト間のホッピングのみの場合	20
2.2.3 第 2 最隣接サイト間のホッピングがある場合	21
第 3 章 Mott 絶縁体のスレーブ・ローター理論	25
3.1 スレーブ・ローターの方法における基本的な考え方	25
3.2 概要: 原子極限	26
3.2.1 モデル	26
3.2.2 自己無撞着方程式の絶対零度における解	27
3.3 Hubbard モデル	29
3.3.1 スレーブ・ローター	29
3.3.2 H_f の波数表示	30
3.3.3 簡単化されたモデル	31
3.3.4 Mott 転移	32
第 4 章 反強磁性秩序状態でのスレーブ・ローター理論	37
4.1 スレーブ・ローター	37
4.2 H_f の波数表示	38
4.3 自己無撞着方程式	40

第 5 章 軌道間交換相互作用を持つ 2 軌道 Hubbard モデルの定式化	45
5.1 自己無撞着方程式	45
5.2 結果と考察	48
第 6 章 結論	51
付 録 A 1 軌道 Hubbard モデルにおける Fermi エネルギーの定義	53
A.1 Fermion 数を用いた定義	53
A.2 自由エネルギー J を用いた定義	55
付 録 B 補足の数値計算結果	57
B.1 軌道 A, B の Fermi 面	57
B.2 $t'_A = 0, t'_B/t = 0.1, 0.3$ のときの数値計算結果	57
付 録 C Anderson モデルのスレーブ・ローター理論による解析	59
C.1 スレーブ・ローター	59
C.2 自己無撞着方程式の解析	60
付 録 D シグマモデルによるスレーブ・ローター理論の定式化	65
D.1 シグマモデルによる定式化	65
D.2 金属-絶縁体転移	67
D.2.1 絶縁体相	67
D.2.2 金属相: $U < U_c$	69
D.2.3 位相変数の集団モード	71

第1章 序論

1.1 磁性有機導体 λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$

1.1.1 電荷移動錯体

少数の元素の原子からなる固体である無機系物質に対し、分子からなる固体である分子性物質において、電気伝導を示すものは**有機導体**と呼ばれる.[1, 2]

本論文は、それらの中で、擬 2 次元磁性有機導体 λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ が持つ実験的に確認された温度相図を、理論的に説明することを目的とする．ここで、BETS=bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene であり、BEDT-TTF 分子の中央にある 4 つの S 原子を Se 原子に置き換えた分子である． λ は、結晶が c 軸方向に成長した細い針状晶であることを意味する.[3]

一般に、有機導体は分子式 D_2X を持つ電荷移動錯体である.[2, 3, 4] ここで、**電荷移動錯体** D_2X とは、磁気モーメントを持つ無機**アニオン分子** X の層と**ドナー分子** D からなる層とが交互に並んだ分子性物質のことである．当該物質の場合、 $X = \text{FeCl}_4$ 及び $D = \text{BETS}$ である．

当該物質の結晶構造を図 1.1 に示す．

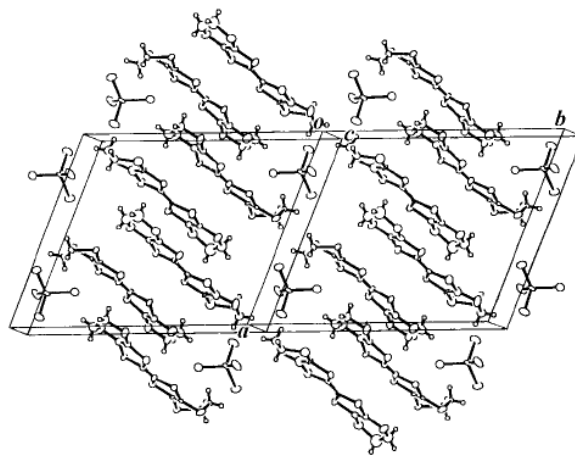


図 1.1: λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ の結晶構造．四面体の骨格がアニオン分子である FeCl $_4$ である．Fe $^{3+}$ スピンの大きさは $S = 5/2$ である．Ref.[5] からの引用．

一般に、有機導体において、ドナー分子の最高占有準位の分子軌道である **HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital)** と最低非占有準位の分子軌道である **LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital)** とが電気伝導において重要な役割を果たす．

このときに、特に当該物質においては、1個のアニオン分子当たり1個の電子(1個のダイマー超分子 D_2 当たり1個の正孔)をドナー分子がアニオン分子に供給し、ダイマー超分子の HOMO に正孔が生じ、この正孔が電気伝導を担う。ダイマー D_2 において、2個のドナー分子 D がそれぞれ持つ HOMO は、軌道が2重に縮退しており、かつダイマー D_2 は1個しか正孔を持っていないため、そのときにダイマー D_2 は正孔について $1/4$ フィリングになる。この2つの軌道の間の正孔のホッピング t_d により、ダイマー間のホッピング t_i によるダイマーバンド $W \sim 4t_i$ に対して $[2]2t_d > W$ のとき、これらの縮退した HOMO が、準位差 $2t_d$ の結合性分子軌道と反結合性分子軌道とに重なりなく分裂し、軌道間の縮退が解ける。一方で、 $2t_d < W$ のときには軌道間の縮退は解けない。この状況を図 1.2 に示す。

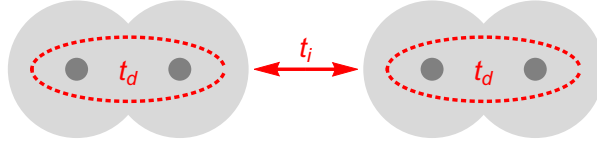


図 1.2: ドナー分子上の on-site Coulomb エネルギー (電子間の遮蔽された Coulomb 反発力によるエネルギー) 以外に、ダイマー内でのドナー分子間のホッピング t_d 、及びダイマー間でのホッピング t_i とがある。Ref.[2] を参考にした。

本論文では、 $2t_d < W$ のときのモデルを考える。Ref.[6] における Mori モデルが該当する。このとき、当該物質は、擬 2 次元結晶上の各ダイマー超分子に平均して 1 個の正孔が占有する、すべてで 4 軌道 (バンド) の $3/4$ フィリングの強相関電子系となる。この結晶は空間群 $P\bar{1}$ を持ち、各軌道は当該物質のユニットセル内のすべてで 4 個の各 BETS 分子に対応している.[6, 7] 当該物質は Fermi エネルギー近傍では、4 軌道の内 2 軌道のみで記述できる。4 軌道では $3/4$ フィリングであったが、これらの 2 軌道ではハーフフィリングとなる。

1.1.2 Fermi 面と相図

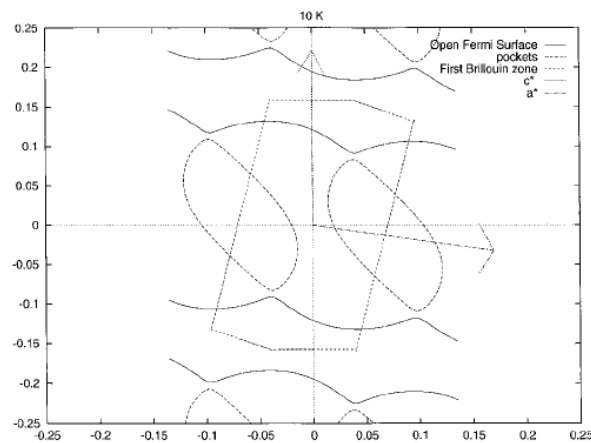


図 1.3: 10 [K] での λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ の Fermi 面。Ref.[5] からの引用。

重要な点として、図 1.3 から読み取れるように、当該物質には 2 種類の Fermi 面が存在しており、片方の電子 Fermi 面はネスティングが完全に近く (ネスティングベクトル $\mathbf{Q} \approx (0, \pi)$)、もう片方の正孔 Fermi 面はネスティングが不完全である。このことにより、前者の Fermi 面はネスティングの構造からの応答としての反強磁性秩序状態である **Spin Density Wave (SDW)** 状態を起こしやすく、後者の Fermi 面は SDW 状態を起こしにくい。

より重要な点として、当該物質の温度相図において、 $T_{\text{MI}} \sim 8.3$ [K] 以上の温度においては**常磁性金属**であり、 T_{MI} 以下の温度においては**反強磁性絶縁体**となることが実験において確認されている.[8, 5] ここで、反強磁性秩序は c 軸方向を容易軸として起こり (図 1.4)、その転移は金属-絶縁体転移と同時に起こる。

図 1.4 に反強磁性転移を実験的に確認したグラフを示す。

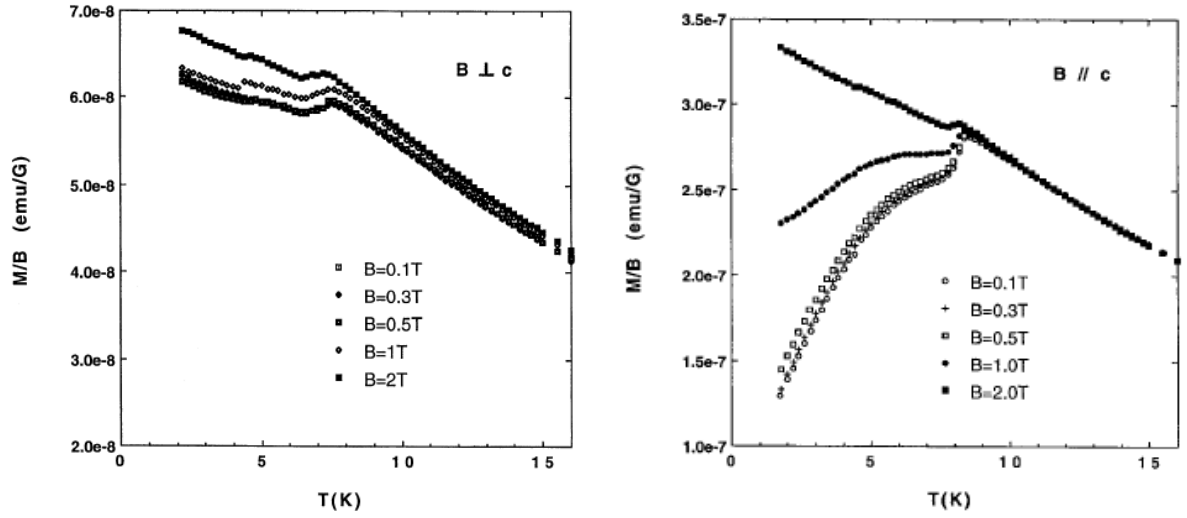


図 1.4: 低温での λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ の静的帯磁率の温度依存性. $B \perp c$ 軸の場合 (左パネル), $B \parallel c$ 軸の場合 (右パネル). 共に Ref.[5] からの引用。

図 1.5 に相図を示す。当該物質は $x = 1$ の場合である。

1.1.3 反強磁性秩序の起源としての伝導 π 電子の SDW 状態

当該物質は、アニオン分子における $S = 5/2$ の Fe^{3+} スピンによる局在化モーメントを持ち、伝導 π 電子と、この Fe^{3+} スピンとは、 π - d 相互作用と呼ばれる大きさ $J_{\pi-d} \sim 17$ K の反強磁性の交換相互作用を持つ。¹

当該物質の反強磁性秩序の起源を示唆する 3 つの実験結果を述べる。

第一に、帯磁率について、局在化モーメントが典型的な反強磁性転移の振る舞いを示すにも関わらず、秋葉らの余剰比熱測定の実験により、Néel 温度 T_{MI} 以下でも Fe^{3+} スピンが常磁性を示すことが判った.[13] ここで、余剰比熱から算出される T_{MI} 以下での余剰エントロピーは、 $S = 5/2$ の Fe^{3+} スピンの自由度の 80 パーセント程の自由度となり、この実験による結論が妥当であることを示す。この秋葉らの結果は、伝導 π 電子が当該物質における反強磁性転移において主導的な役割を果たしていることを示唆する。

¹ 当該物質は、この π - d 相互作用の存在により Jaccarino-Peter 効果として磁場誘起超伝導を発現し、注目を集めることとなった.[10, 11, 12]

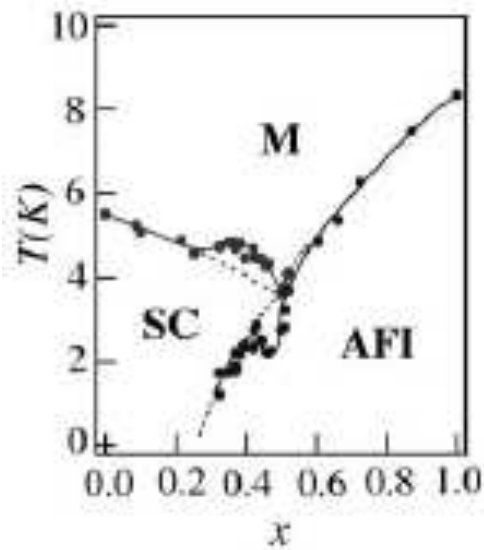


図 1.5: λ -(BETS) $_2$ Fe $_x$ Ga $_{1-x}$ Cl $_4$ の相図. M は金属相を、AFI は反強磁性絶縁体相を、SC は超伝導相を指す. Ref.[9] からの引用.

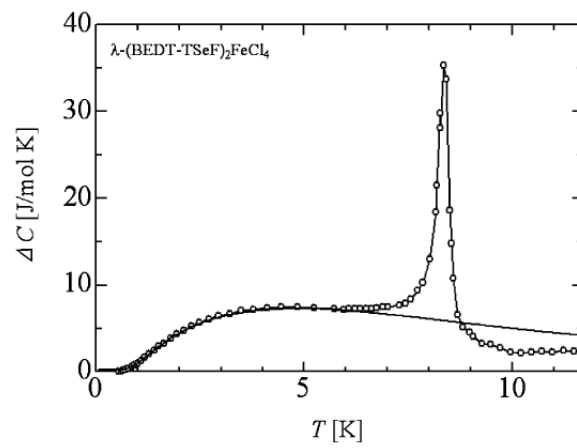


図 1.6: 格子振動を除いた余剰比熱 ΔC の測定結果. 局在した Fe $^{3+}$ スピンを常磁性と仮定した、6 準位 Schottky 型比熱による理論式によってフィッティングしている. $T_{\text{MI}} \sim 8.3$ K 以下においても、局在した Fe $^{3+}$ スピンは常磁性相と判る. Ref.[13] からの引用.

第二に、強束縛モデルにおいて、相互作用をしない伝導 π 電子のスピンの帯磁率は、第 1 Brillouin ゾーン (BZ) における波数ベクトル $\mathbf{q}_0 = (0, \pi)$ 近傍において最大値を取ることが指摘された.[14, 15] この最大値は、絶縁化する前の電子 Fermi 面のネスティングベクトル $\mathbf{Q} \approx \mathbf{q}_0$ による良いネスティング構造に起源すると考えられる。

第三に、当該物質のアニオン分子 FeCl_4 における Fe を完全に Ga に置換した、局在化磁気モーメントを持たない $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{GaCl}_4$ における ^{13}C -NMR 実験において、伝導 π 電子間の反強磁性スピン相関が温度降下につれて成長することが示唆されている.[16] まず、55 K までの温度降下において、Curie-Weiss 則による反強磁性スピン相関の成長が、核スピン-格子緩和率 $1/T_1$ を温度 T によって割った $1/T_1T$ の増大として観測されている。次に、10 K 以下での温度降下において Curie-Weiss 則による $1/T_1T$ の増大と、NMR 線幅の拡大とが観測され、Fermi 面のネスティング効果として説明できる。

以上の 3 つの実験結果により、当該物質の反強磁性秩序は伝導 π 電子の SDW の形成に帰着できる、と考えられる。

1.2 Mott 絶縁体転移

一般に、2 次元正方格子において定義されたハーフフィリングの強相関電子系が持つ最も興味深い性質の 1 つに **Mott 絶縁体転移**がある.[17, 18]

この系はバンド理論の描像では基底状態は金属相であるが、on-site Coulomb エネルギーが電子の運動エネルギーを大きく上回るとき、基底状態において格子上の各サイトを 1 個の電子が占有することになる。このとき、基底状態はスピン自由度について 2^N 重に縮退している。 N はサイトの総数である。

この系を研究するための出発点となる量子多体系のモデルが、サイト間のホッピングを持つ強束縛電子モデルに on-site Coulomb 相互作用 $U > 0$ を取り込んだ、Hubbard モデルである。(図 1.7 を参照.)[19]

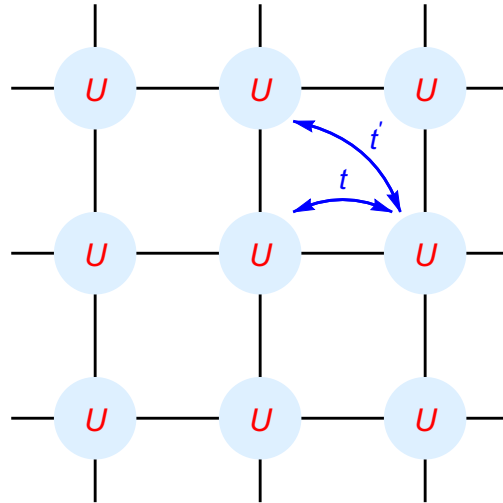


図 1.7: 2 次元正方格子 Hubbard モデル. U は電子間の on-site Coulomb 相互作用を表し、 t は最隣接サイト間、 t' は第 2 最隣接サイト間の、電子のホッピングパラメータを表す。

ハーフフィリングの強相関電子系において、Mott 転移には 2 つのシナリオが知られている.[20]

1つ目は、**Mott-Hubbard シナリオ**である。(図 1.8.)[19] このシナリオでは、 U の値は伝導バンドの幅 W を大きく上回るとする。このとき、 U が無いときに金属相にあった元々の伝導バンド以外に、系の基底状態から励起した状態を表す第二のエネルギーバンドである上部 Hubbard バンドが、on-site Coulomb 相互作用の結果、出現する。この2つのバンドは on-site Coulomb エネルギーの値 U だけ離れている。このとき、2つのバンドの間のギャップが開き、化学ポテンシャル μ がギャップの間に位置しており絶縁化する。

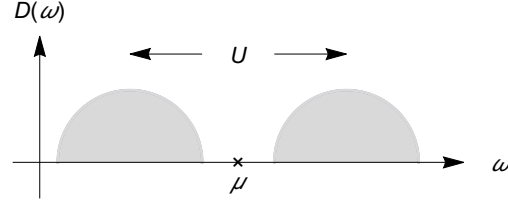


図 1.8: Mott-Hubbard シナリオの結果. 状態密度 $D(\omega)$ の図であり、上部 Hubbard バンド (右) と下部 Hubbard バンド (左) とがエネルギー U だけ隔てられている。化学ポテンシャル μ はギャップの間に位置し、系が絶縁化する。

2つ目は、**Brinkman-Rice シナリオ**である。(図 1.9.)[21] これは、提唱された時点での理論においては、常磁性状態かつハーフフィリングの強相関電子系の基底状態の Gutzwiller 近似による解析に基づいている.[21, 22] このシナリオでは、準粒子重み Z がゼロとなり電気伝導を担う準粒子の有効質量が発散することにより伝導バンドの幅がなくなり ($W \rightarrow 0$) 絶縁化する。

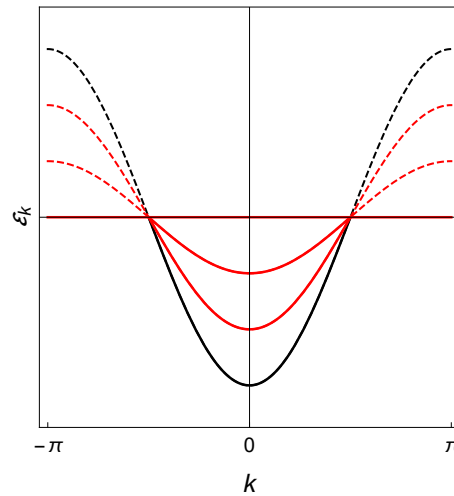


図 1.9: 準粒子重み Z がゼロへ接近することによる準粒子の伝導バンドの幅の減少の様子。黒の曲線によって示した伝導バンド ($Z = 1$) が最終的に平坦なバンド ($Z = 0$) となることにより、準粒子の有効質量が発散し系が絶縁化する。

Mott 転移の両シナリオを統一的に記述する**動的平均場理論**の観点から言えば、前者は原子に局在したインコヒーレントな励起に、後者は結晶全体に広がったコヒーレントな励起に着目したシナリオである.[23]

1.3 モデルの概要

本論文では、 $\lambda-(\text{BETS})_2\text{FeCl}_4$ の温度相図を理論的に説明する描像を得るために、互いに交換相互作用する 2 軌道 (バンド) での、最隣接ユニットセル間のホッピング t と第 2 最隣接ユニットセル間のホッピング t' とを取り入れた、 t - t' - U Hubbard モデルを考案し、反強磁性秩序状態である SDW 状態が存在する下で金属-絶縁体転移のシナリオを調べた。このモデルにおいて、Fermi 面のネスティングが良い軌道 ($t = 1, t' = 0$) と悪い軌道 ($t = 1, t' \neq 0$) を仮定し、 U は両軌道間で共通であるとした。

具体的には、2-軌道で、ハーフフィリングの強相関電子系を考え、バンド幅 W を変えることにより、絶対零度において、

- (i) 低い U/W の値で常磁性金属相にあり、
- (ii) 高い U/W の値で反強磁性絶縁体相にある

傾向を持つモデルを構築した。(ii) の性質においては、ネスティングが悪い Fermi 面を持つ軌道は絶縁化しにくいため、絶対零度での解析において、金属-絶縁体転移点を与える U/W の値を著しく下げる機構を考案することが目的である。

一般に Fermi 面に良いネスティングの構造があるときに、そのことを反映して、伝導バンド幅 W を狭めることにより U/W の値が増えるにつれて、伝導 π 電子の SDW 状態が系の反強磁性秩序として生じ、安定化する。

我々の 2 軌道の Hubbard モデルにおいては、軌道間交換相互作用により、ネスティングが良い Fermi 面を持つ軌道において安定化した反強磁性秩序状態である SDW 状態が、スタaggered な分子場として、もう片方の Fermi 面のネスティングが悪い軌道と相互作用し、このスタaggered な分子場に引きずられる形で、このもう片方の軌道においても反強磁性秩序状態である SDW 状態が安定化すると考えられる。

このモデルにおいて、まず、性質 (i) は、最隣接ユニットセル間のホッピングの他に第 2 最隣接ユニットセル間のホッピングを仮定していることから実現される。実際に、このことを仮定していることにより Fermi 面のネスティングが不完全となり、ある臨界値よりも低い U/W において常磁性となる。さらに、SDW 状態の立ち上がりによるバンドギャップが開く位置が原点からずれ、低い U/W の値で金属相が実現するからである。

次に、2 軌道の SDW 状態が安定化するにつれて Fermi 面のネスティングが悪い軌道の準粒子重みが減り、その軌道の反強磁性秩序が完全となったときに、その軌道において Mott 転移が実現する。そのときの U/W の臨界値は、両軌道間の交換相互作用がないときに比べ著しく減少する。

しかし、このとき、具体的な軌道間交換相互作用の強さを与えて系を解析した結果、Fermi 面のネスティングが悪い軌道について、この Mott 転移よりも強相関効果によるバンド絶縁化の方が先行することが判った。その軌道の、強相関効果によるバンド絶縁化が実現する U/W の値は、軌道間交換相互作用を強くすると著しく下がった。

このことにより、(ii) の性質を定性的に説明できる。

1.4 本論文の構成

本論文の構成は、以下の通りである。

第2章において、Ref.[24]に沿って、まず on-site Coulomb 相互作用を Hartree-Fock 近似により取り扱う理論を説明する．ここで、基底状態として反強磁性秩序状態を仮定し、1 サイトあたりの電子の平均占有数と SDW 秩序変数の、2 つの平均場を導入する．この章での定式化は一般の形のホッピング t を持った軌道について行うが、最終的には最隣接サイト間ホッピングのみの軌道の解析に用いる．

第3章において、Ref.[25]に沿って、S. Florens と A. Georges によって提案されたスレーブ・ローターのアプローチの枠組みを説明し、この方法によって Hubbard モデルにおいて Mott 転移を記述できることを、常磁性かつ多軌道の場合に説明する．この章での定式化は、Fermi 面のネスティングが悪い軌道における絶縁化の解析に用いる．

第4章において、反強磁性秩序状態下で、1 軌道の Hubbard モデルにおけるスレーブ・ローターの方法を用いた、サイト間のホッピングの平均エネルギー及び平均場の計算を行う．

第5章において、軌道間に交換相互作用を取り入れた 2 軌道 Hubbard モデルを、絶対零度において、第2章、第4章での計算を基に自己無撞着方程式を定式化した後に、数値的に解く．

第6章において、結論と課題を述べる．

付録 A において、ハーフフィリングの 1 軌道 Hubbard モデルにおける Fermi エネルギーを、(1) 1 サイト当たりの平均占有電子数が 1 であるという条件、及び、(2) 大正準集団の自由エネルギーを用いた条件、によって 2 通りに定義し、両者が同一の定義であることを確認する．

付録 B においては、第5章における補足的な数値計算の結果を示した．

付録 C においては、第3章において説明したスレーブ・ローターの方法を、金属に添加された磁性不純物を記述する Anderson モデルに、Florens-Georges による原論文 Ref.[25] に沿って適用する．

付録 D においては、第3章において説明したスレーブ・ローター理論をシグマモデルを用いて定式化し、金属-絶縁体転移の解析を Ref.[25] における結果に沿って行う．

第2章 Hubbardモデルにおける反強磁性秩序状態

2.1 Spin Density Wave (SDW) 状態

始めに、on-site Coulomb 相互作用がないときに、格子定数 $a = 1$ の2次元固体結晶 (正方格子) 上における、最隣接サイト間のホッピングのみの強束縛電子からなる系を考える。エネルギーバンドは

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu \quad (2.1)$$

である。 μ は電子の化学ポテンシャルであり、絶対零度のとき Fermi エネルギーである。このエネルギーバンドに対して、エネルギーの基準値を与える化学ポテンシャル μ の値がゼロのとき、1 サイトあたり平均して1 電子が占有するハーフフィリングの系となり、Fermi 面 ($\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$) は

$$\cos k_x = -\cos k_y \quad (2.2)$$

で与えられる。この Fermi 面を波数空間において図示すると図 2.1 となる。

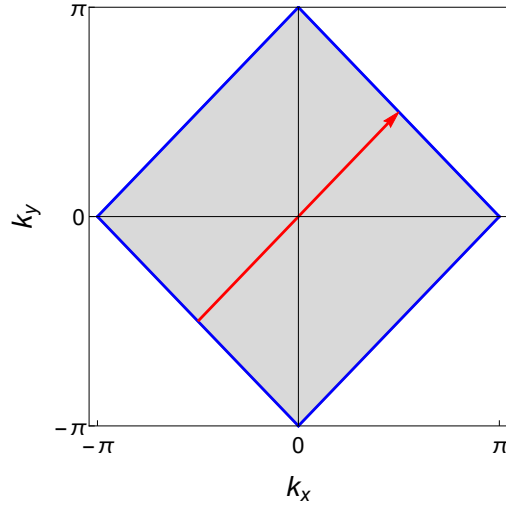


図 2.1: 化学ポテンシャルの値がゼロのときの、Fermi 面 ($\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$: 青). $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ はネスティングベクトル. Fermi エネルギー以下の準位を占有している電子は灰色で示した領域となる。

この Fermi 面は、波数ベクトル (π, π) , $(\pi, -\pi)$, $(-\pi, \pi)$, $(-\pi, -\pi)$ 等、を用いた平行移動により完全に重なる。これらのベクトルをネスティングベクトルと呼ぶ。以下、ネスティングベクトルを $\mathbf{Q}$ と記し、特に、

$$\mathbf{Q} = (\pi, \pi) \quad (2.3)$$

と選ぶ。

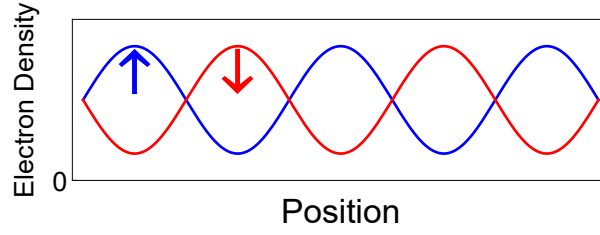


図 2.2: SDW 状態. 青曲線は↑スピンの電子密度波であり、赤曲線は↓スピンの電子密度波である.

以下、**Spin Density Wave (SDW)** 状態について説明する.

まず、SDW 状態は、↑スピンの電子密度波と↓スピンの電子密度波が空間的に半波長ずれた状態であり (図 2.2 を参照)、次の 2 つの、サイトに依らない平均場によって記述できる.

$$n = \langle n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} \rangle, \quad (2.4)$$

$$m = \frac{1}{2} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} \langle n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow} \rangle. \quad (2.5)$$

ここで、(2.3) により $e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} = e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} = \pm 1$ に注意する. 但し、 $n_{j\sigma}$ によりサイト j におけるスピン σ の電子の個数演算子を記す. これらの 2 式は $\langle n_{j\uparrow} \rangle, \langle n_{j\downarrow} \rangle$ について逆に解けて

$$\langle n_{j\uparrow} \rangle = \frac{1}{2} n + e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} m, \quad (2.6)$$

$$\langle n_{j\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} n - e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} m \quad (2.7)$$

を得る. 次に、秩序相 $m \neq 0$ を考える. このとき、

1. ↑スピンと↓スピンとで、それらの個数の違いを生む第 2 項の符号が任意のサイト $\mathbf{r}_j$ において逆である.
2. $e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j}$ は、 $\mathbf{r}_j$ が $\pm x, \pm y$ の任意の方向に 1 格子進んだときに符号が反転する.

このことは、2 格子進めば元の値に戻ることも示す.

これら 2 点により、このとき系は実空間での周期 $2a$ の反強磁性秩序状態にある. この状態は、SDW 状態と呼ばれる. ここで正方格子上で

$$j: \text{偶のサイト} \Leftrightarrow e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} = 1, \quad (2.8)$$

$$j: \text{奇のサイト} \Leftrightarrow e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} = -1 \quad (2.9)$$

と呼ぶ.

2.2 On-site Coulomb 相互作用の Hartree-Fock 近似

2.2.1 一般の隣接サイト間のホッピングの場合

本章の残りにおいて、on-site Coulomb 相互作用を取り入れた、Hubbard モデル

$$H_{\text{Hubbard}} = \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \mu \sum_i \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.10)$$

を考える. $c_{j\sigma}$ は、サイト j におけるスピン σ の電子の消滅演算子である. 隣接サイト間のホッピングを表す行列 t_{ij} としては、一般の場合とする.

本章の以下の内容は、Ref.[24] により得られているものである.

on-site Coulomb 相互作用 $H_U = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ の Hartree-Fock 近似による、Hubbard モデルのハミルトニアン H の平均場近似

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \mu \sum_i \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i (\langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle) \quad (2.11)$$

は

$$H_{\text{MF},U} = U \sum_j \left\{ \left(\frac{1}{2} n + e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} m \right) n_{j\downarrow} + \left(\frac{1}{2} n - e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} m \right) n_{j\uparrow} - \left(\frac{1}{4} n^2 - m^2 \right) \right\} \quad (2.12)$$

により

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \sum_i \left(-\mu + \frac{1}{2} U n \right) n_{i\sigma} + m U \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} n_{j\downarrow} \\ &\quad - m U \sum_j e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} n_{j\uparrow} + U N \left(m^2 - \frac{1}{4} n^2 \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

となる.

電子の実空間での生成消滅演算子の、波数空間での表示

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}, \quad (2.14)$$

$$c_{i\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \quad (2.15)$$

を以下用いる.

また、還元された Brillouin ゾーン (RBZ) を

$$\text{RBZ} \equiv \{(k_x, k_y) \mid |k_x + k_y| \leq \pi\} \quad (2.16)$$

により定義する. (図 2.3 を参照.)

このとき、(2.13) の第 1 項と第 2 項として、それぞれ

$$\sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \sum_{\sigma} \sum_i \mu c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \stackrel{\xi_{\mathbf{k}}}{=} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.17)$$

$$= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (\xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \quad (2.18)$$

及び

$$\sum_{\sigma} \sum_i \frac{1}{2} U n c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} = \frac{1}{2} U n \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.19)$$

$$= \frac{1}{2} U n \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \quad (2.20)$$

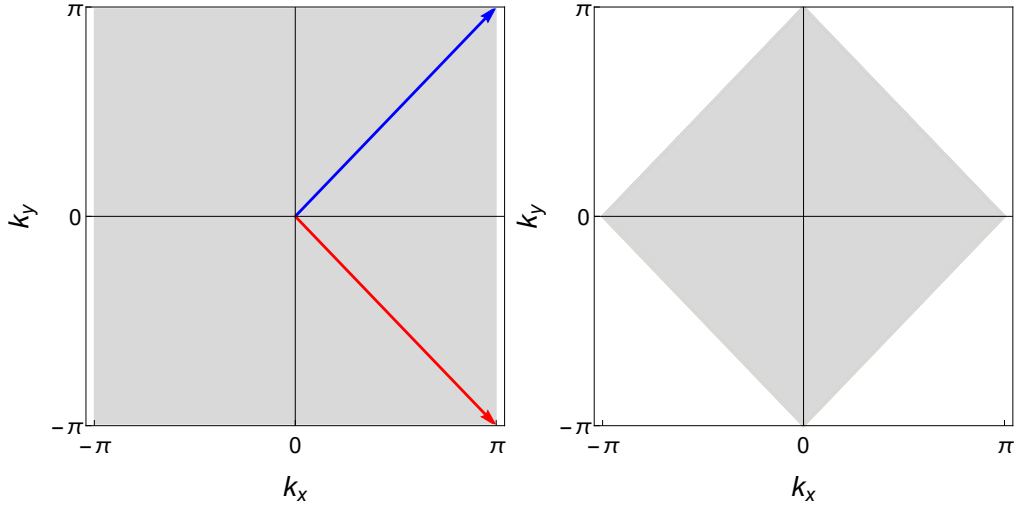


図 2.3: 左パネル:BZ と、 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ 及び $\mathbf{Q}' = (\pi, -\pi)$. 右パネル:RBZ.

を得る. これら 2 項を纏めて

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \sum_{\sigma} \sum_i \left(\mu - \frac{1}{2} U n \right) c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \\ &= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left(\left(\xi_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U n \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \frac{1}{2} U n \right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

を得る.

(2.13) の残る第 3 項と第 4 項は、まず第 3 項について、 $\mathbf{Q}' = (\pi, -\pi)$ として

$$-mU \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\uparrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\uparrow} \right\} = -mU \sum_j e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} \quad (2.22)$$

$$= -\frac{mU}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{k}' \in \text{BZ}} \sum_j e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (2.23)$$

$$= -mU \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{k}' \in \text{BZ}} (\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{Q}} + \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{Q}'} + \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{Q}'}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (2.24)$$

$$= -mU \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}) \quad (2.25)$$

を得る. 全く同様に、第 4 項について

$$mU \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\downarrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\downarrow} \right\} = mU \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad (2.26)$$

を得る.

$(c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, c_{\mathbf{k}\downarrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow})^t$ 及び $(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger})$ を、この順序で縦横の基底ベクトルとして、 H_{MF} の係数を行列表示すると

$$H_{\text{MF}} - UN \left(m^2 - \frac{1}{4} n^2 \right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} U n + \xi_{\mathbf{k}} & -mU & 0 & 0 \\ -mU & \frac{1}{2} U n + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} U n + \xi_{\mathbf{k}} & mU \\ 0 & 0 & mU & \frac{1}{2} U n + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

となる. RBZ では $c_{\mathbf{k}\sigma}$ と $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}$ とは互いに独立していることに注意する. この行列の固有状態はスピン自由度について 2 重に縮退しており、そのエネルギー固有値は

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{2}Un + \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right)^2 + m^2U^2} \quad (2.28)$$

となる.

波数表示において、平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \left(\mu - \frac{1}{2}Un\right) \sum_{\sigma} \sum_i n_{i\sigma} \\ &\quad + UN \left(m^2 - \frac{1}{4}n^2\right) - Um \sum_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$= H_{\uparrow} + H_{\downarrow} + UN \left(m^2 - \frac{1}{4}n^2\right) \quad (2.30)$$

となる. 但し、

$$\begin{aligned} H_{\sigma} &\equiv \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left\{ \left(\xi_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}Un\right) n_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \frac{1}{2}Un\right) n_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \right\} \\ &\quad - \sigma Um \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}), \quad \sigma = 1 (\uparrow), \quad \sigma = -1 (\downarrow) \end{aligned} \quad (2.31)$$

と定義した.

H_{MF} を対角化することにより、大正準集団の自由エネルギーを計算すると

$$J = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi \quad (2.32)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \{2 \ln(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}) + 2 \ln(1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}})\} + m^2 NU - \frac{1}{4} n^2 NU \quad (2.33)$$

を得る. このとき、自由エネルギー J を m について最小にする状態が実現する. このことから、自己無撞着方程式として

$$\frac{\partial J}{\partial m} = 2 \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\frac{\partial E_{\mathbf{k}}^{(+)}}{\partial m} n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + \frac{\partial E_{\mathbf{k}}^{(-)}}{\partial m} n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \right] + 2mNU \quad (2.34)$$

$$= 2mU^2 \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)})}{\sqrt{[\frac{1}{2}(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})]^2 + U^2 m^2}} + 2mNU \quad (2.35)$$

$$= 0 \quad (2.36)$$

を得る. 書き換えると、

$$m = \frac{Um}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)})}{\sqrt{[\frac{1}{2}(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})]^2 + U^2 m^2}} \quad (2.37)$$

である.

但し、よく使われる記法として、フェルミオン系の熱平衡状態における Fermi-Dirac 分布関数を

$$n_F(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} + 1} \quad (2.38)$$

と記した. 特に、絶対零度において、Heaviside の階段関数 $\theta_H(\epsilon)$ に対し、Fermi-Dirac 分布関数は

$$n_F(\epsilon)|_{T=0} = \theta_H(-\epsilon) \quad (2.39)$$

となる.

2.2.2 最隣接サイト間のホッピングのみの場合

次に、電子のホッピングが最隣接サイト間のみの場合を、絶対零度かつハーフフィリングにおいて考える。
(以下、 $t = 1$ と置く。) エネルギー分散は

$$\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu \quad (2.40)$$

$$= -2(\cos k_x + \cos k_y) - \mu \quad (2.41)$$

である。

このとき、Hubbard モデルの、on-site Coulomb 相互作用の Hartree-Fock 近似において、SDW 秩序変数 m の自己無撞着方程式は

$$m = \frac{Um}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)})}{\sqrt{[\frac{1}{2}(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})]^2 + U^2 m^2}} \quad (2.42)$$

$$= \frac{Um}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + U^2 m^2}} \quad (\because T = 0) \quad (2.43)$$

である。この方程式は、 $E_{\mathbf{k}}^{(-)} < 0$, $E_{\mathbf{k}}^{(+)} > 0$ が $\mathbf{k}$ について恒等的に成り立つため

$$1 = \frac{U}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + m^2 U^2}} \quad (2.44)$$

となる。

この方程式の解のグラフは図 2.4 のようになる。[26]

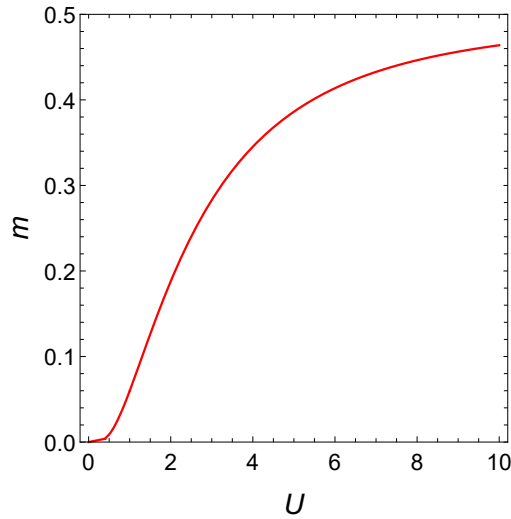


図 2.4: 絶対零度かつハーフフィリング、最隣接サイト間のホッピング項のみでの $U - m$ のグラフ。

このとき、Fermi エネルギーの値は m の値に関わらず $\mu = 0$ である。

2.2.3 第2最隣接サイト間のホッピングがある場合

最後に、最隣接サイト間のホッピングの他に第2最隣接サイト間のホッピングを取り入れた

$$\xi_{\mathbf{k}} = -2(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu \quad (2.45)$$

の場合を、絶対零度かつハーフフィリングにおいて考える。¹

このとき、絶対零度において、Fermi エネルギー μ を決める条件は

$$1 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} [\theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + \theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(-)})] \quad (2.46)$$

である。(付録 A を参照.) これを $m = 0$ の場合に、 μ について $\mu = \mu(t')$ の形で解いたグラフは図 2.5 のようになる。

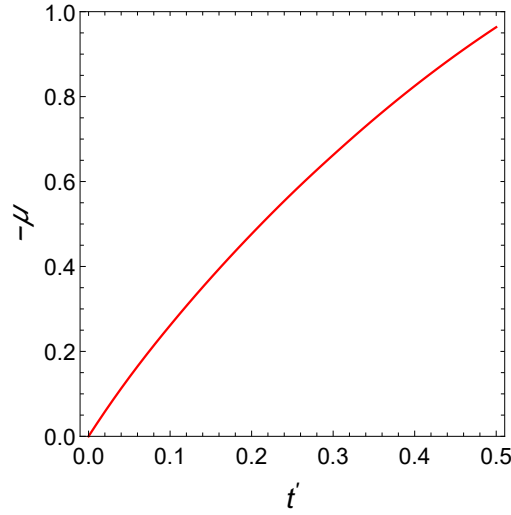


図 2.5: 絶対零度かつハーフフィリング、 $m = 0$ の場合での、 $t' - \mu$ のグラフ。

この $\mu(t')$ に対して、

$$1 = \frac{U}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - \theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(+)})}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + m^2 U^2}} \quad (2.47)$$

が、 $t' \neq 0$ についての、自己無撞着方程式である。

特に、SDW 秩序が立ち始めた直後 ($m = 0^+$) の自己無撞着方程式は

$$1 = \frac{U_c}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - \theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(+)})}{|\epsilon_{\mathbf{k}}|} \quad (2.48)$$

$$= \frac{U_c}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{k} \in D} \frac{1}{|\epsilon_{\mathbf{k}}|} \quad (2.49)$$

となる。その時点での U の値を U_c と記した。この式の積分領域 D は、 $t' = 0.2$ に対して、図 2.6 のグラフにある。

この自己無撞着方程式 (2.49) を解くことにより得られた、一般の t' での、SDW 秩序変数 m が立ち上がる直前での on-site Coulomb エネルギーの臨界値 U_c ($m = 0^+$) のグラフは図 2.7 になる。

¹ t' の符号の取り方は、Ref.[24] に従っている。

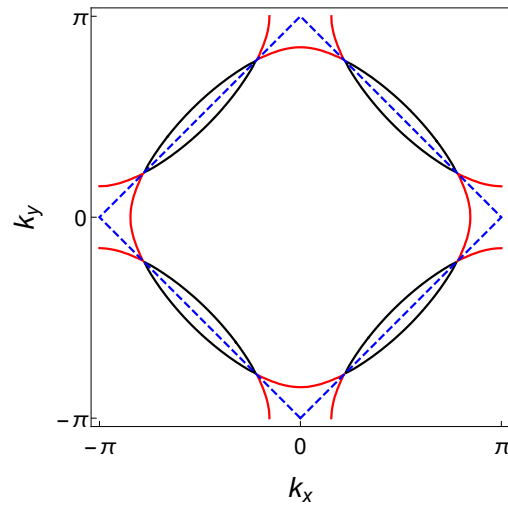


図 2.6: $t' = 0.2$, $m = 0^+$ のとき、エネルギーバンドは $E_{\mathbf{k}}^{(-)}$ と $E_{\mathbf{k}}^{(+)}$ とからなる. 2つの Fermi 面 $E_{\mathbf{k}}^{(-)} = 0$ 及び $E_{\mathbf{k}}^{(+)} = 0$ をそれぞれ、黒線と赤線により示した. ($t' = 0$, $m = 0^+$ のときには Fermi 面はない.) このとき、(2.49) の第 1 Brillouin ゾーン内での積分領域 D は、(2.48) により、RBZ において黒線の外側の領域 ($E_{\mathbf{k}}^{(-)} < 0$) から赤線の内側の領域 ($E_{\mathbf{k}}^{(+)} < 0$) を引いたものであり、このグラフの最も内側の領域 $E_{\mathbf{k}}^{(-)} < 0$, $E_{\mathbf{k}}^{(+)} > 0$ である.

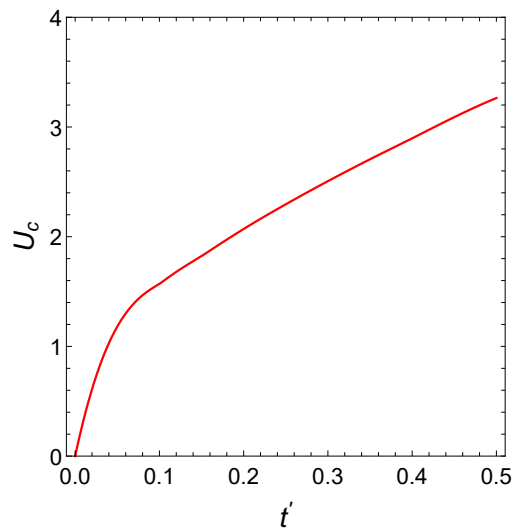


図 2.7: $t' - U_c$ のグラフ.

図 2.7 において、 t' がゼロでないときに Fermi 面のネスティングが不完全となり、ゼロではない U_c よりも低い U の値では反強磁性秩序が生じずに常磁性相 ($m = 0$) が実現している。

第3章 Mott 絶縁体のスレーブ・ローター理論

3.1 スレーブ・ローターの方法における基本的な考え方

ハーフフィリングの系において、金属相と (Mott) 絶縁体相を区別するときに、1 サイトあたりの平均電子占有数 $\langle n_j \rangle = 1$ ($n_j \equiv n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}$) を用いたのでは勿論区別ができない.

一方、電子について、位相自由度 θ_j を個数演算子 n_j と共役な変数として

$$[\theta_j, n_j] = i \quad (3.1)$$

と定義し、電子の消滅演算子に

$$c_{j\sigma} = e^{-i\theta_j} f_{j\sigma} \quad (3.2)$$

の形で入れれば、

$$-tc_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = -te^{i(\theta_i - \theta_j)} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} \quad (3.3)$$

となる. このとき、 f の準粒子重みが後に示す仮定の下で

$$\langle e^{i(\theta_i - \theta_j)} \rangle_\theta = \langle \cos \theta \rangle_\theta^2, \quad i \neq j \quad (3.4)$$

となることが分かる.

よって、

$$\text{金属相} : \langle \cos \theta \rangle_\theta \neq 0, \quad (3.5)$$

$$\text{絶縁体相} : \langle \cos \theta \rangle_\theta = 0 \quad (3.6)$$

のように、位相変数 θ の波動関数によって金属相と Mott 絶縁体相を区別することが出来る. (図 3.1 を参照.)

更に、この方法では、多体相互作用である on-site Coulomb 相互作用を、 $n_{j\sigma}^2 = n_{j\sigma}$ に注意して、

$$Un_{j\uparrow}n_{j\downarrow} = \frac{U}{2}[(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow})^2 - (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow})] \quad (3.7)$$

$$= \frac{U}{2}[n_j^2 - n_j] \quad (3.8)$$

$$= \frac{U}{2}[(n_j - 1)^2 + n_j] - \frac{U}{2} \quad (3.9)$$

と変形すれば、これはハーフフィリングかつ 1 軌道の系においての、電子の個数演算子 n_j に共役なローター θ_j の運動エネルギーとなる. 結果、システムは拘束条件下で、自由な準粒子 f と、ポテンシャル中を運動するローターとに分離できる. このとき、モデルを解くことは、ローターの導入の際に課された自己無撞着方程式を解くことに帰着する.

以下における記法として、ローターの演算子にはハットを付ける.

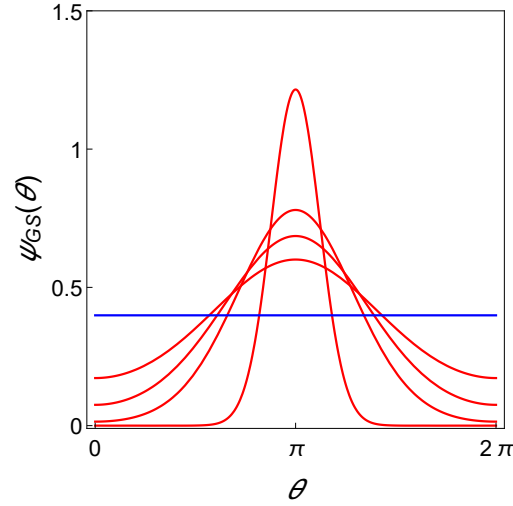


図 3.1: スレーブ・ローターの基底状態の波動関数 $\psi_{\text{GS}}(\theta)$ (実関数) による金属相 (赤曲線) と絶縁体相 (青直線) の区別.

3.2 概要: 原子極限

3.2.1 モデル

Florens-Georges の具体的な方法は次である.[25]

電子からなる系であり、on-site Coulomb エネルギー U を取り込んだハミルトニアン

$$H_{\text{at}} = \sum_{\sigma} \epsilon_0 d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \frac{U}{2} \left[\sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} - \frac{N_c}{2} \right]^2 \quad (3.10)$$

によって記述されるものを考える. (サイト間のホッピング項がない為、このモデルは**原子極限**と呼ばれる.)

$\sigma = 1, 2, \dots, N_c$ は電子のカラー量子状態の添え字であり、 d_{σ} は電子の消滅演算子である. 例えば、 $N_c = 2$ は軌道数が 1, スピンが $1/2$ の系、 $N_c = 4$ は軌道数が 2, スピンが $1/2$ の系に対応する.

ここで、電子 d_{σ} を

$$d_{\sigma}^{\dagger} \equiv f_{\sigma}^{\dagger} e^{i\theta}, \quad d_{\sigma} \equiv f_{\sigma} e^{-i\theta} \quad (3.11)$$

と、準粒子 f_{σ} と位相 θ とに自由度を分離し、 f_{σ} の個数演算子

$$\hat{L} = \sum_{\sigma} \left[f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} - \frac{1}{2} \right] \quad (3.12)$$

を導入する. ここで、 $\hat{L}$ のスペクトルは、その間隔が 1 であり、

$$\text{Spec} \hat{L} = -\frac{N_c}{2}, -\frac{N_c}{2} + 1, \dots, \frac{N_c}{2} - 1, \frac{N_c}{2} \quad (3.13)$$

である.

このとき、

$$H_{\text{at}} = \sum_{\sigma} \epsilon_0 f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \frac{U}{2} \hat{L}^2, \quad \hat{L} = -i \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (3.14)$$

と書ける. $\hat{L}$ は $e^{i\theta}$ と共役であり、準粒子 f の自由な項と、位相 θ の運動エネルギーの項とに、拘束条件 (3.12) の下で分離出来る. 特に、準粒子の多体相互作用が位相変数の運動エネルギーに置き換わる点が顕著である. ここで、拘束条件を課しているので、位相の自由度をスレーブ・ローターと呼ぶ.

以下、分離を実行すると、拘束条件

$$C \equiv \hat{L} - \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} - \frac{N_c}{2} = 0 \quad (3.15)$$

に対するラグランジュ未定乗数 h を導入すれば、ハミルトニアン $H_{\text{at}} + hC$ は

$$H_f^{\text{at}} = (\epsilon_0 - h) \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}, \quad (3.16)$$

$$H_{\theta}^{\text{at}} = \frac{U}{2} \hat{L}^2 + h \left(\hat{L} - \frac{N_c}{2} \right) \quad (3.17)$$

に対し、 $H_f^{\text{at}} + H_{\theta}^{\text{at}}$ へ、自己無撞着方程式

$$\langle \hat{L} \rangle_h \equiv \frac{1}{Z_{\theta}} \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \ell e^{-\beta E_{\ell}} \quad (E_{\ell} = \frac{U\ell^2}{2} + h\ell, \quad Z_{\theta} = \sum_{\ell} e^{-\beta E_{\ell}}) \quad (3.18)$$

$$= N_c \left[n_F(\epsilon_0 - h) - \frac{1}{2} \right] \quad (\because (3.12)) \quad (3.19)$$

の下で帰着される. 与えられた U に対して、 h の値は、この自己無撞着方程式を解くことにより決定される.

3.2.2 自己無撞着方程式の絶対零度における解

まず、 $\langle \hat{L} \rangle_h$ を考える.

$$\langle \hat{L} \rangle_h = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_{\theta}} \frac{\partial Z_{\theta}}{\partial h} \quad (3.20)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_{\theta}}{\partial h} \quad (3.21)$$

であるが、

$$Z_{\theta} = \sum_{\ell} e^{-\beta E_{\ell}}, \quad E_{\ell} = \frac{U\ell^2}{2} + h\ell \quad (3.22)$$

である. このセクションの最後に見るように、絶対零度においては、自己無撞着方程式は簡単に解くことが出来る.

以下、

$$\langle \hat{Q} \rangle = \left\langle \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right\rangle \quad (3.23)$$

を簡単のため $N_c = 4$ の系について、絶対零度において計算する.

Q 番目のエネルギー準位 E_Q は、 $\binom{N_c}{Q}$ だけ縮退しているから、

$$\langle \hat{Q} \rangle_{\text{at}} = \frac{1}{Z_{\text{at}}} \sum_{Q=0}^{N_c} \binom{N_c}{Q} Q e^{-\beta E_Q} \quad (3.24)$$

$$= \frac{1}{Z_{\text{at}}} \{ 4e^{-\beta E_4} + 12e^{-\beta E_3} + 12e^{-\beta E_2} + 4e^{-\beta E_1} \} \quad (3.25)$$

であり、

$$Z_{\text{at}} = \sum_Q \binom{N_c}{Q} e^{-\beta E_Q} \quad (3.26)$$

$$= e^{-\beta E_4} + 4e^{-\beta E_3} + 6e^{-\beta E_2} + 4e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_0} \quad (3.27)$$

である。ここで、絶対零度、つまり、 β を無限大にしたときに、 $\langle \hat{Q} \rangle_{\text{at}}$ の分子も、分母である Z_{at} も共に 0 となる。このとき、分子、分母の中で、 E_Q が最も小さい項のみを残して残りを捨てればよい。

ここで、

$$E_Q = \epsilon_0 Q + \frac{U}{2} \left(Q - \frac{N_c}{2} \right)^2 \quad (3.28)$$

$$= \epsilon_0 Q + \frac{U}{2} (Q - 2)^2 \quad (\because N_c = 4) \quad (3.29)$$

により、表

	ϵ_0	$\frac{3}{2}U - 0^+$	$\frac{U}{2} - 0^+$	$-\frac{U}{2} - 0^+$	$-\frac{3}{2}U - 0^+$
E_4		$8U$	$4U$	0	$-4U$
E_3		$5U$	$2U$	$-U$	$-4U$
E_2		$3U$	U	$-U$	$-3U$
E_1		$2U$	U	0	$-U$
E_0		$2U$	$2U$	$2U$	$2U$

(3.30)

を得る。太字で記した箇所が、 ϵ_0 の値毎の最も小さい E_Q である。

以上を用いて $\langle \hat{Q} \rangle$ を計算すると、図 3.2 のような左上がりの階段状のグラフとなる。

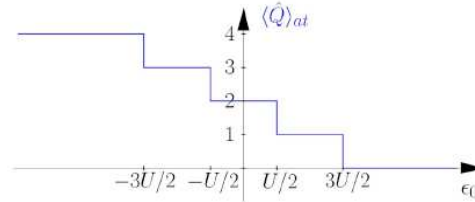


図 3.2: $N_c = 4$ の場合。絶対零度においての、 ϵ_0 の関数としての $\langle \hat{Q} \rangle_{\text{at}}$. Ref.[25] から引用した。

この結果と同じことを $\langle \hat{L} \rangle_h$ に対して行えば、この h の関数は左上がりの階段状のグラフとなる。但し、 $\langle \hat{Q} \rangle$ と違い、自己無撞着方程式を課さなければ上限と下限はない。 $N_c = 4$ のときに、自己無撞着方程式を与える $4n_F(\epsilon_0 - h) - 2$ は、絶対零度において

$$4n_F(\epsilon_0 - h)|_{T=0} - 2 = 4\theta_H(h - \epsilon_0) - 2 \quad (3.31)$$

となり、 h の関数として右上がりの 1 階段状のグラフとなる。これらは 1 点で交わり、これが自己無撞着方程式の解である。(図 3.3.)

結果、

$$Q = \frac{N_c}{2} + \ell \quad \text{for} \quad -U \frac{2\ell + 1}{2} < \epsilon_0 < -U \frac{2\ell - 1}{2} \quad (3.32)$$

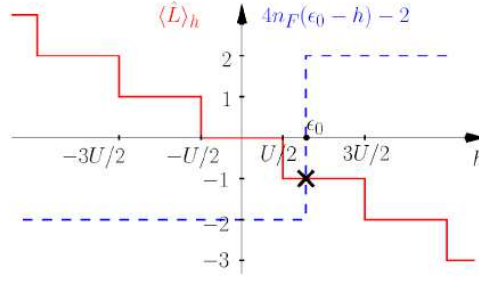


図 3.3: 絶対零度においての、 h の関数としての $\langle \hat{L} \rangle_h$ (赤線) 及び $4n_F(\epsilon_0 - h) - 2$ (青破線). Ref.[25] から引用した.

を得る. この式が、絶対零度における、原子極限のモデルの自己無撞着方程式の解である.

3.3 Hubbard モデル

3.3.1 スレーブ・ローター

このセクションにおいて、原子極限のモデルをサイト間のホッピング項を加えることにより変更した Hubbard モデルに、スレーブ・ローターの方法を適用する.

ハミルトニアンは

$$H = \sum_i H_{\text{at}}(i) - \sum_{ij, \sigma} t_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \quad (3.33)$$

$$= \left[\sum_{i\sigma} \epsilon_0 f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_i \hat{L}_i^2 \right] - \sum_{ij\sigma} t_{ij} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} e^{i(\theta_i - \theta_j)} \quad (3.34)$$

となる. (3.34) において、始めの 2 項は先に見た原子極限におけるエネルギーと同じであり、最後の項が各サイト間の d 電子のホッピングを表す.

このモデルにスレーブ・ローターの方法を適応すると、 $H + hC$ は

$$H_f = - \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{\text{eff}} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + (\epsilon_0 - h) \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}, \quad (3.35)$$

$$H_\theta = - \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} \cos(\theta_i - \theta_j) + \sum_i \left(\frac{U}{2} \hat{L}_i^2 + h \hat{L}_i \right) \quad (3.36)$$

へ帰着する. 但し、新たに導入した平均場についての自己無撞着方程式

$$t_{ij}^{\text{eff}} = t_{ij} \langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle_\theta, \quad (3.37)$$

$$\mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} = \sum_\sigma t_{ij} \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} \rangle_f \quad (3.38)$$

及び、拘束条件についての自己無撞着方程式

$$\langle \hat{L} \rangle_\theta = \sum_\sigma \left(\langle f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle_f - \frac{1}{2} \right) \quad (3.39)$$

が課される.

ここで重要な注意として、 $H + hC$ の H_f と H_θ の和への分離の際に

$$\langle f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} \rangle_f, \quad \langle \exp i(\theta_i - \theta_j) \rangle_\theta \quad (3.40)$$

は共に**実数**であると仮定している.

3.3.2 H_f の波数表示

以下、自己無撞着方程式を立てる前準備として、 H_f の波数表示を行う.

N を格子点数とする. 準粒子 f の消滅演算子を Fourier 変換すると

$$f_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j f_{j\sigma} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (3.41)$$

を得る.

ここで、準粒子重み

$$Z = \langle \exp i(\theta_i - \theta_j) \rangle_\theta \quad (3.42)$$

$$= \langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle_\theta \quad (3.43)$$

$$= \langle \cos \theta \rangle_\theta^2 \quad (3.44)$$

を導入する.

t_{ij} を、最隣接格子点間においてのみ 0 でない値、 t を取るとすると

$$-\sum_\sigma \sum_{ij} t_{ij}^{\text{eff}} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} = -\frac{Zt}{N} \sum_{ij} \sum_\sigma \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}_j} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma} \quad (3.45)$$

$$= -\frac{Zt}{N} \sum_{ij} \sum_\sigma \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i))} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}_j} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma} \quad (3.46)$$

$$= -\frac{Zt}{N} \sum_{ij} \sum_\sigma \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma} \quad (3.47)$$

$$= -Zt \sum_\sigma \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \boldsymbol{\delta} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i \quad (3.48)$$

$$\sum_\sigma \sum_i (\epsilon_0 - h) f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = (\epsilon_0 - h) \sum_\sigma \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.49)$$

を得る. 但し、 $\boldsymbol{\delta} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ についての和は、最隣接格子点 i, j について取っている.

よって、準粒子 f のハミルトニアン の波数表示

$$H_f = \sum_\sigma \sum_{\mathbf{k}} (Z\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_0 - h) f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.50)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} \equiv -t \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} \quad (3.51)$$

$$= -2t(\cos k_x + \cos k_y) \quad (3.52)$$

を得る.

3.3.3 簡単化されたモデル

Hubbard モデルのオリジナルなスレーブ・ローターモデルは、平均場のサイト依存性による数が多く、解析が困難である。以下、次の平均場のサイト依存性を簡単化したモデルを考える。

$$H_{\theta}^{\text{MF}} = \sum_i \left(\frac{U}{2} \hat{L}_i^2 + h \hat{L}_i \right) + \sum_i K \cos \theta_i. \quad (3.53)$$

但し、

$$K = -2 \sum_j \mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} \langle \cos \theta_j \rangle_{\theta} \quad (3.54)$$

$$= -2 \sum_j \sum_{\sigma} t_{ij} \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f \langle \cos \theta_j \rangle_{\theta} \quad (3.55)$$

である。

このとき、平均場及び拘束条件に対する自己無撞着方程式は

$$K = -2 \langle \cos \theta \rangle \left(\sum_{\sigma} \sum_j t \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f \right) \quad (3.56)$$

$$= 2N_c \langle \cos \theta \rangle \int d\epsilon D(\epsilon) \epsilon n_F(Z\epsilon + \epsilon_0 - h) \quad (\because (3.35), (3.37), (3.43)) \quad (3.57)$$

及び

$$\langle \hat{L} \rangle_{\theta} = \sum_{\sigma} \left(\langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} \rangle_f - \frac{1}{2} \right) \quad (3.58)$$

$$= N_c \int d\epsilon D(\epsilon) \left[n_F(Z\epsilon + \epsilon_0 - h) - \frac{1}{2} \right] \quad (\because (3.35), (3.37), (3.43)) \quad (3.59)$$

と書き下される。

ここで、(3.57) を導出する。

$$H_f = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \xi_{\mathbf{k}} \equiv Z\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_0 - h \quad (3.60)$$

であるので

$$- \sum_{\sigma} \sum_j t \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f = \frac{1}{N} \langle \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_f \quad (3.61)$$

$$\equiv \frac{1}{N} \text{tr} \left[\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \frac{e^{-\beta H_f}}{\text{tr} e^{-\beta H_f}} \right] \quad (3.62)$$

$$= \frac{1}{N} \text{tr} \left[\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\prod_{\mathbf{k}\sigma} e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma}}}{\text{tr} \prod_{\mathbf{k}\sigma} e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma}}} \right] \quad (\because (3.60)) \quad (3.63)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \frac{e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}}}}{1 + e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}}}} \frac{\text{tr} \prod_{\mathbf{k}'(\neq \mathbf{k})\sigma} e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}'\sigma}}}{\text{tr} \prod_{\mathbf{k}'(\neq \mathbf{k})\sigma} e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}'\sigma}}} \quad (3.64)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \frac{e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}}}}{1 + e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}}}} \quad (3.65)$$

$$= \frac{1}{N} \int d\epsilon \left\{ \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right\} \epsilon \frac{1}{1 + e^{\beta \xi}} \quad (3.66)$$

$$= N_c \int d\epsilon D(\epsilon) \epsilon \frac{1}{1 + e^{\beta \xi}} \quad (\because D(\epsilon) \equiv \int d\mathbf{k} \frac{1}{(2\pi)^2} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})) \quad (3.67)$$

$$= N_c \int d\epsilon D(\epsilon) \epsilon n_F(Z\epsilon + \epsilon_0 - h) \quad (3.68)$$

を得る. (3.59) の導出も、これと全く同様にしてできる.

準粒子 f の Green 関数は

$$G_f(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1} = i\omega_n - \epsilon_0 + h - Z\epsilon_{\mathbf{k}} \quad (3.69)$$

であり、有効質量 m^* は

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{Z} \quad (3.70)$$

を満たす. 後に、Mott 転移により $Z = 0$ ($m^* = \infty$) となったとき、原子極限 H_{at} に帰着することに注意する.

ここで、 μ_0 を相互作用のないバンドエネルギーのみの系の化学ポテンシャル

$$\int_{-\infty}^{\mu_0} d\epsilon D(\epsilon) = n \quad (3.71)$$

により定義すれば

$$n \equiv \frac{1}{N_c} \sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} \rangle_f \quad (3.72)$$

$$= \int d\epsilon D(\epsilon) n_F(Z\epsilon + \epsilon_0 - h) \quad (3.73)$$

により、絶対零度において

$$n = \int d\epsilon D(\epsilon) \theta_H(-Z\mu_0(n) - \epsilon_0 + h) \quad (3.74)$$

であるため、(3.71) と照合して、階段関数の変数の値が Fermi エネルギーにおいて 0 に等しい必要があり、

$$h - \epsilon_0 = Z\mu_0(n) \quad (3.75)$$

を得る.

絶対零度において、自己無撞着方程式 (3.56), (3.59) は

$$K = 2N_c \bar{\epsilon}(n) \langle \cos \theta \rangle_{\theta}, \quad (3.76)$$

$$\langle \hat{L} \rangle_{\theta} = N_c \left(n - \frac{1}{2} \right) \quad (3.77)$$

となる. 但し、相互作用のない、バンドエネルギーのみのモデルでの、1 電子自由度あたりの平均運動エネルギー

$$\bar{\epsilon}(n) = \int_{-\infty}^{\mu_0(n)} d\epsilon D(\epsilon) \epsilon \quad (3.78)$$

を導入した.

3.3.4 Mott 転移

以下、絶縁体相: $Z=0$ を考える.

スレーブ・ローターの θ 表示の波動関数 $\Psi(\theta)$ が満たす波動方程式は

$$\left[-\frac{U}{2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + K \cos \theta \right] \Psi(\theta) = E \Psi(\theta) \quad (3.79)$$

である. 以下、 $K \neq 0$ として、 $K \cos \theta$ を摂動エネルギー項とみなす.

まず、摂動を加える前、つまり $K = 0$ のときに、ローターの基底状態は

$$|\Psi_{\ell_n}\rangle = e^{i\ell_n\theta}, \quad (3.80)$$

$$\ell_n = N_c \left(n - \frac{1}{2} \right) \quad (3.81)$$

である.

$K \neq 0$ のとき、1 次の摂動によって得たローターの基底状態

$$|\Psi_0^{(1)}\rangle = |\Psi_{\ell_n}\rangle + \sum_{\ell \neq \ell_n} \frac{\langle \Psi_{\ell} | K \cos \theta | \Psi_{\ell_n} \rangle}{E_{\ell_n} - E_{\ell}} |\Psi_{\ell}\rangle \quad (3.82)$$

について、期待値

$$\langle \cos \theta \rangle_{\theta} = \langle \Psi_0^{(1)} | \cos \theta | \Psi_0^{(1)} \rangle \quad (3.83)$$

$$= 2K \sum_{\ell \neq \ell_n} \frac{|\langle \Psi_{\ell} | \cos \theta | \Psi_{\ell_n} \rangle|^2}{E_{\ell_n} - E_{\ell}} + \mathcal{O}(K^2) \quad (\because \langle \Psi_{\ell_n} | \cos \theta | \Psi_{\ell_n} \rangle = 0) \quad (3.84)$$

$$= 2K \left[\frac{1/4}{E_{\ell_n} - E_{\ell_{n-1}}} - \frac{1/4}{E_{\ell_{n+1}} - E_{\ell_n}} \right] \quad (3.85)$$

$$= 2K \left[\frac{1/4}{(U/2)(2\ell_n - 1) + h} - \frac{1/4}{(U/2)(2\ell_n + 1) + h} \right] \quad (\because E_{\ell} = U \frac{\ell^2}{2} + h\ell) \quad (3.86)$$

$$= 2K \left[\frac{1/4}{(U\ell_n + h) - U/2} - \frac{1/4}{(U\ell_n + h) + U/2} \right] \quad (3.87)$$

$$= -\frac{2UK}{U^2 - 4(U\ell_n + h)^2} \quad (3.88)$$

$$= \frac{K}{2N_c \bar{\epsilon}(n)} \quad (\because \text{自己無撞着方程式 (3.76)}) \quad (3.89)$$

を得る.

Mott 転移を考えると、 $Z = 0$ により原子極限の場合に帰着し、そのときの結果

$$\ell_n = \text{Int} \left[\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_0}{U} \right] \quad (\because (3.32)), \quad (3.90)$$

$$n = \frac{\langle \hat{Q} \rangle}{N_c} \quad (3.91)$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{\ell_n}{N_c} \quad (\because (3.32)) \quad (3.92)$$

が使える. 更に、Mott 転移において $Z = 0$ により、このとき (3.75) により $h = \epsilon_0$ を得る. よって、(3.88), (3.89) により、 $Z = 0$ での臨界値 $U_c = U_c(\epsilon_0)$ は

$$-\frac{2U_c K}{U_c^2 - 4(U_c \ell_n + \epsilon_0)} = \frac{K}{2N_c \bar{\epsilon}(n)} \quad (3.93)$$

を満たす. この方程式を整理して

$$U_c(\epsilon_0)^2 - 4[U_c(\epsilon_0)\ell_n + \epsilon_0]^2 + 4N_c \bar{\epsilon}(n)U_c(\epsilon_0) = 0 \quad (3.94)$$

を得る. このとき、

$$\frac{\partial U_c(\epsilon_0)}{\partial \epsilon_0} = 0 \quad (3.95)$$

の解を $U_c(n)$ と記す. 図 3.4 から分かるように, $U_c(n)$ は n についての U の臨界値である.

(3.94) を ϵ_0 によって微分して, (3.95) を使えば

$$\epsilon_0 = -U_c \ell_n \quad (3.96)$$

を得る. よって, (3.94) は

$$U_c(n)^2 + 4N_c \bar{\epsilon}(n) U_c(n) = 0 \quad (3.97)$$

となり,

$$U_c(n) = 4N_c |\bar{\epsilon}(n)| \quad (3.98)$$

を得る.

(3.94) を, ϵ_0 について解くと

$$\epsilon_0 = \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + 4N_c \bar{\epsilon}(n) U} - U_c \ell_n \quad (3.99)$$

$$= \pm \frac{U}{2} \sqrt{1 - \frac{U_c}{U}} - U_c \ell_n \quad (\because (3.98)) \quad (3.100)$$

を得る. このとき, (3.92) により与えられる整合なフィリング n からの, 無限小のドーピングによる化学ポテンシャルの飛びは

$$\Delta\mu = -\Delta\epsilon_0 \quad (3.101)$$

$$= \mu(n + 0^+) - \mu(n - 0^+) \quad (3.102)$$

$$= U \sqrt{1 - \frac{U_c}{U}} \quad (3.103)$$

となる.

以下, 整合なフィリングに対して相図を書く. まず, $N_c = 4$ 及び整合なフィリング $n = 1/4, 1/2, 3/4$ に対して, 表

$4n$	$Q = N_c n$	$\ell_n = N_c n - \frac{N_c}{2}$	$4N_c \bar{\epsilon}(n)$
1	1	-1	$-3D$
2	2	0	$-4D$
3	3	1	$-3D$

(3.104)

を得る. 但し, 状態密度関数 $D(\epsilon)$ としては平坦なものを選んだ. $D(\epsilon)$ の幅の半分を D と記している. よって, $U_c = U_c(\epsilon_0)$ が満たす方程式として

$$Q = 1 \quad \left(\frac{U_c}{D}\right)^2 - 4\left(-\frac{U_c}{D} + \frac{\epsilon_0}{D}\right)^2 - 3\frac{U_c}{D} = 0, \quad (3.105)$$

$$Q = 2 \quad \left(\frac{U_c}{D}\right)^2 - 4\left(\frac{\epsilon_0}{D}\right)^2 - 4\frac{U_c}{D} = 0, \quad (3.106)$$

$$Q = 3 \quad \left(\frac{U_c}{D}\right)^2 - 4\left(\frac{U_c}{D} + \frac{\epsilon_0}{D}\right)^2 - 3\frac{U_c}{D} = 0 \quad (3.107)$$

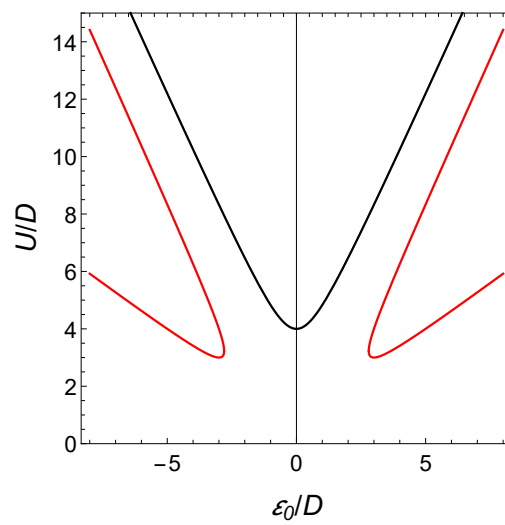


図 3.4: $N_c = 4$ の場合の相図. 左から順に、 $Q = 3$, $Q = 2$, $Q = 1$ における臨界曲線である. フィリング数は $n = Q/N_c$ によって与えられ、特に $Q = 2$ のときはハーフフィリング: $n = 1/2$ である.

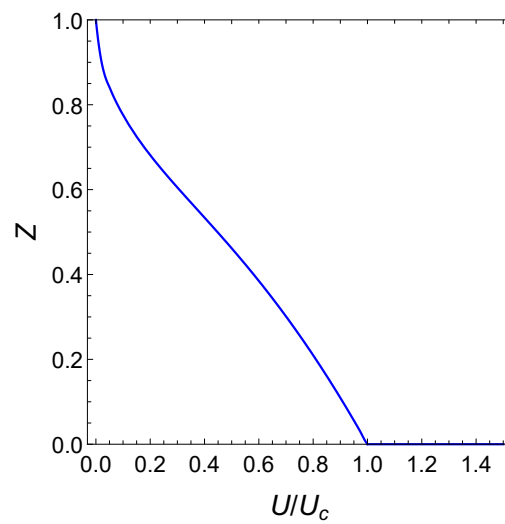


図 3.5: ハーフフィリングかつ絶対零度における、準粒子重み Z の U に対する依存性.

を得る. これらの方程式により、 $N_c = 4$ の場合の相図 3.4 を得る.

最後に、図 3.5 に、ハーフフィリングかつ絶対零度においての、準粒子重み Z の U に対する依存性のグラフを載せる.

ここで、ハーフフィリングであるため $h = 0$ であり、このときに $\langle \hat{L} \rangle_\theta = 0$ が従う.

K についての自己無撞着方程式は、与えられた U の値毎に、 K についての反復法により数値的に容易に解くことが出来る. 得られた K の値から $Z = \langle \cos \theta \rangle_\theta^2$ を計算し、この図 3.5 を得た.

第4章 反強磁性秩序状態でのスレーブ・ローター理論

4.1 スレーブ・ローター

本章では、1 軌道の Hubbard モデルのハミルトニアンにスタaggerドな磁場との相互作用項を加えた

$$H_0 = \sum_{\sigma} \sum_j \epsilon_0 n_{j\sigma} + \frac{U}{2} \left[\sum_{\sigma} \sum_j \left\{ n_{j\sigma} - \frac{1}{2} \right\} \right]^2 - \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} d_{i\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} + M \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) \quad (4.1)$$

を考える.¹ このモデルは、次章において説明する軌道間に交換相互作用を入れた 2 軌道 Hubbard モデルにおける、軌道 B のモデルとなる。その際に、ここで扱うスタaggerドな磁場は、軌道 A における SDW 状態を持つスタaggerドな分子場に置き換わる。

このモデルをスレーブ・ローターの方法を用いて解析するために、前章と同様に準粒子 f の生成消滅演算子を

$$d_{j\sigma}^{\dagger} = e^{i\theta_j} f_{j\sigma}^{\dagger}, \quad (4.2)$$

$$d_{j\sigma} = e^{-i\theta_j} f_{j\sigma} \quad (4.3)$$

によって導入する。

H_0 に拘束条件 hC を加えたものは

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\sigma} \sum_j \epsilon_0 n_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_i \hat{L}_i^2 - \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} e^{i(\theta_i - \theta_j)} \\ & + h \sum_j (\hat{L}_j - \sum_{\sigma} n_{j\sigma}) + M \sum_{j:\text{偶}} (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) - M \sum_{j:\text{奇}} (n_{j\downarrow} - n_{j\uparrow}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

となる。これは準粒子 f のハミルトニアン

$$H_f = - \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij}^{\text{eff}} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \sum_j (\epsilon_0 - h) n_{j\sigma} + \sum_{j:\text{偶}} M (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) - \sum_{j:\text{奇}} M (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) \quad (4.5)$$

$$= - \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij}^{\text{eff}} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \sum_j (\epsilon_0 - h) n_{j\sigma} + M \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\uparrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\uparrow} \right\} - M \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\downarrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\downarrow} \right\} \quad (4.6)$$

とスレーブローターのハミルトニアン

$$H_{\theta} = - \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} \cos(\theta_i - \theta_j) + \sum_i \left(\frac{U}{2} \hat{L}_i^2 + h \hat{L}_i \right) \quad (4.7)$$

との和に分解できる。

¹この形の電子間相互作用は、Ref.[27] において、鉄系超伝導体における SDW 状態の解析において用いられた。また、Ref.[28] において、鉄系超伝導体における磁性的シナリオとしての SDW 状態を軌道間 on-site Coulomb 相互作用を取り入れたスレーブ・ローターの方法によって扱った議論がなされている。

オブザーバブルの期待値は

$$\langle \mathcal{O}_f \rangle_f \equiv \text{tr} \mathcal{O}_f \frac{e^{-\beta H_f}}{\text{tr} e^{-\beta H_f}}, \quad (4.8)$$

$$\langle \mathcal{O}_\theta \rangle_\theta \equiv \text{tr} \mathcal{O}_\theta \frac{e^{-\beta H_\theta}}{\text{tr} e^{-\beta H_\theta}} \quad (4.9)$$

により定義される. $\beta = 1/k_B T$ は系の逆温度である. この定義に含まれるが、絶対零度におけるオブザーバブルの期待値は、準粒子 f と、ローターの基底状態 $|\Psi_f\rangle$ 、 $|\Psi_\theta\rangle$ を用いて

$$\langle \mathcal{O}_f \rangle_f \equiv \langle \Psi_f | \mathcal{O}_f | \Psi_f \rangle, \quad (4.10)$$

$$\langle \mathcal{O}_\theta \rangle_\theta \equiv \langle \Psi_\theta | \mathcal{O}_\theta | \Psi_\theta \rangle \quad (4.11)$$

により定義される.

4.2 H_f の波数表示

以下、準粒子 f のハミルトニアン

$$H_f = - \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij}^{\text{eff}} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \sum_j (\epsilon_0 - h) n_{j\sigma} + M \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\uparrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\uparrow} \right\} - M \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\downarrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\downarrow} \right\} \quad (4.12)$$

を波数表示する.

ホッピングは、最隣接サイト間のものと第2最隣接サイト間のものの2つを想定する.

準粒子 f の実空間での生成消滅演算子の波数空間での表示

$$f_{j\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j}, \quad (4.13)$$

$$f_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} f_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (4.14)$$

により、最隣接サイト間について得られる

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -t \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta}, \quad \delta = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \quad (4.15)$$

$$= -2t(\cos k_x + \cos k_y), \quad (4.16)$$

$$Z \equiv \langle \cos \theta \rangle_{\theta}^2 \quad (4.17)$$

に対して、 H_f の第1項の最隣接サイト間のホッピング

$$-Zt \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} Z \epsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.18)$$

$$= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} Z (\epsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \quad (4.19)$$

及び、 H_f の第2項

$$\sum_{\sigma} \sum_i (\epsilon_0 - h) f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} = (\epsilon_0 - h) \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.20)$$

$$= (\epsilon_0 - h) \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \quad (4.21)$$

を得る. これら 2 項を纏め、更に、第 2 最隣接サイト間のホッピングを取り入れることにより、

$$\xi_{\mathbf{k}} \equiv Z\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_0 + 4Zt' \cos k_x \cos k_y - h \quad (4.22)$$

に対して

$$-Z \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{ij} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} + \sum_{\sigma} \sum_i (\epsilon_0 - h) f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (\xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \quad (4.23)$$

を得る.

H_f の残る第 3 項と第 4 項は、まず第 3 項について、 $\mathbf{Q}' = (\pi, -\pi)$ として

$$M \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\uparrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\uparrow} \right\} = M \sum_j e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} f_{j\uparrow}^{\dagger} f_{j\uparrow} \quad (4.24)$$

$$= \frac{M}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{k}' \in \text{BZ}} \sum_j e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j} f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (4.25)$$

$$= M \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{k}' \in \text{BZ}} (\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{Q}} + \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{Q}'} + \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{Q}'}) f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (4.26)$$

$$= M \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\uparrow}) \quad (4.27)$$

を得る. 全く同様に、第 4 項について

$$-M \left\{ \sum_{j:\text{偶}} n_{j\downarrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\downarrow} \right\} = -M \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} (f_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad (4.28)$$

を得る.

ここで、 $(f_{\mathbf{k}\uparrow}, f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, f_{\mathbf{k}\downarrow}, f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow})^t$ 及び $(f_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^{\dagger}, f_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}, f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger})$ を、この順序で縦横の基底ベクトルとして、 H_f の係数を行列表示すると

$$H_f = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & M & 0 & 0 \\ M & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_{\mathbf{k}} & -M \\ 0 & 0 & -M & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

となる. RBZ では $f_{\mathbf{k}\sigma}$ と $f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}$ とは互いに独立していることに注意する. この行列の固有状態はスピン自由度について 2 重に縮退しており、そのエネルギー固有値は

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right)^2 + M^2} \quad (4.30)$$

$$= (\epsilon_0 + 4Zt' \cos k_x \cos k_y - h) \pm \sqrt{Z^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2} \quad (\because \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (4.31)$$

となる. 対応するエネルギー固有状態を

$$E = E_{\mathbf{k}}^{(+)} : \{|e_{\mathbf{k}}^{+,1}\rangle, |e_{\mathbf{k}}^{+,2}\rangle\}, \quad (4.32)$$

$$E = E_{\mathbf{k}}^{(-)} : \{|e_{\mathbf{k}}^{-,1}\rangle, |e_{\mathbf{k}}^{-,2}\rangle\} \quad (4.33)$$

と記す. $|e_{\mathbf{k}}^{\pm,i}\rangle$ を 1 粒子状態に持つ消滅演算子を、 $e_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$ と記す.

4.3 自己無撞着方程式

このモデルにおいて、新たに導入した平均場についての自己無撞着方程式は

$$t_{ij}^{\text{eff}} = t_{ij} \langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle_\theta, \quad (4.34)$$

$$-\mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} = -t_{ij} \sum_{\sigma} \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f \quad (4.35)$$

である。以下、(4.35) の右辺のサイトについての総和を、まず最隣接サイト間のホッピングについて計算する。期待値の被演算子は

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} = \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \epsilon_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \quad (\because \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (4.36)$$

である。ここで、

$$f_{\mathbf{k}\uparrow} = c_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{+,1} + c_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{-,1}, \quad (4.37)$$

$$f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} = d_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{+,1} + d_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{-,1}, \quad (4.38)$$

$$f_{\mathbf{k}\downarrow} = c_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{+,2} + c_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{-,2}, \quad (4.39)$$

$$f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} = d_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{+,2} + d_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{-,2} \quad (4.40)$$

と展開する。

これらの展開式及び、数演算子 $n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$ と、その Fock 空間 $\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$ ($\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{\pm} \equiv \bigoplus_i \mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$) に対して成り立つ

$$n_{\mathbf{k}}^{\pm,i} \equiv e_{\mathbf{k}}^{\pm,i\dagger} e_{\mathbf{k}}^{\pm,i}, \quad (4.41)$$

$$(n_{\mathbf{k}}^{\pm,i})^2 = n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}, \quad (4.42)$$

$$\exp(-\beta E_{\mathbf{k}}^{\pm} n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}) = e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{\pm}} n_{\mathbf{k}}^{\pm,i} + (1 - n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}) \quad (4.43)$$

を使って、最隣接サイト間のホッピングの全エネルギーとして

$$-\sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} = -\sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f \quad (4.44)$$

$$= \text{tr} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \epsilon_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \frac{\exp(-\sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \sum_i \beta (E_{\mathbf{k}}^{(+)} n_{\mathbf{k}}^{+,i} + E_{\mathbf{k}}^{(-)} n_{\mathbf{k}}^{-,i}))}{\text{tr}(\exp(-\sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \sum_i \beta (E_{\mathbf{k}}^{(+)} n_{\mathbf{k}}^{+,i} + E_{\mathbf{k}}^{(-)} n_{\mathbf{k}}^{-,i})))} \quad (4.45)$$

$$= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} - \frac{(|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right\} \right. \\ \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{+}} (f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \epsilon_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} - \frac{(|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right\} \right. \\ \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{-}} (f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \epsilon_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right] \quad (4.46)$$

$$= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left\{ \sum_{i=1}^2 (|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon_{\mathbf{k}} n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^2 (|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon_{\mathbf{k}} n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \right\} \quad (4.47)$$

を得る. ここで、

$$F^+(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^2 (|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \quad (4.48)$$

$$= |c_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 + |c_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 - |d_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 - |d_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 \quad (4.49)$$

$$= \frac{2Z\epsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{Z^2\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}} \quad (4.50)$$

及び

$$F^-(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^2 (|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 - |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \quad (4.51)$$

$$= |c_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 + |c_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 - |d_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 - |d_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 \quad (4.52)$$

$$= -\frac{2Z\epsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{Z^2\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}} \quad (4.53)$$

を用いれば

$$-t \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f = \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \epsilon_{\mathbf{k}} \{ F^+(\epsilon_{\mathbf{k}}) n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + F^-(\epsilon_{\mathbf{k}}) n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \} \quad (4.54)$$

$$= \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{2Z\epsilon_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{Z^2\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}} \{ n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) - n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \} \quad (4.55)$$

を得る.

第2最隣接サイト間のホッピングについては、

$$\epsilon'_{\mathbf{k}} \equiv 4t' \cos k_x \cos k_y \quad (4.56)$$

として、全エネルギーは

$$-\sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} = -\sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f \quad (4.57)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon'_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} - \frac{(|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon'_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right\} \right. \\ &\quad + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}}^+(f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \epsilon'_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \\ &\quad + \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon'_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} - \frac{(|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) \epsilon'_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right\} \\ &\quad \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}}^-(f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \epsilon'_{\mathbf{k}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right] \quad (4.58) \end{aligned}$$

$$= \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\frac{2\epsilon'_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} + \frac{2\epsilon'_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right] \quad (4.59)$$

$$= \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} 2\epsilon'_{\mathbf{k}} \{ n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \} \quad (4.60)$$

となる。但し、この計算において、非自明な計算結果

$$\sum_{\sigma} \sum_{i=1}^2 (|c_{+,k\sigma}^i|^2 + |d_{+,k\sigma}^i|^2) = |c_{+,k\uparrow}^1|^2 + |c_{+,k\downarrow}^2|^2 + |d_{+,k\uparrow}^1|^2 + |d_{+,k\downarrow}^2|^2 \quad (4.61)$$

$$= 2, \quad (4.62)$$

$$\sum_{\sigma} \sum_{i=1}^2 (|c_{-,k\sigma}^i|^2 + |d_{-,k\sigma}^i|^2) = |c_{-,k\uparrow}^1|^2 + |c_{-,k\downarrow}^2|^2 + |d_{-,k\uparrow}^1|^2 + |d_{-,k\downarrow}^2|^2 \quad (4.63)$$

$$= 2 \quad (4.64)$$

を用いた。

スレーブ・ローターの方法における拘束条件についての、自己無撞着方程式は

$$\langle \hat{L} \rangle_{\theta} = \sum_{\sigma} \left(\langle f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} \rangle_f - \frac{1}{2} \right) \quad (4.65)$$

である。

ここで、まず、fermion 数

$$n = \langle n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} \rangle_f \quad (4.66)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_j \langle f_{j\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma} \rangle_f \quad (4.67)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \langle f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \rangle_f \quad (4.68)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{+,k\sigma}^i|^2 + |d_{+,k\sigma}^i|^2) e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} - \frac{(|c_{+,k\sigma}^i|^2 + |d_{+,k\sigma}^i|^2)}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right\} \right. \\ &\quad + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^+}(f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma})}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \\ &\quad + \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{-,k\sigma}^i|^2 + |d_{-,k\sigma}^i|^2) e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} - \frac{(|c_{-,k\sigma}^i|^2 + |d_{-,k\sigma}^i|^2)}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right\} \\ &\quad \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^-}(f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma})}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right] \quad (4.69) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \{ 2(n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)})) - n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(+)}) \} + 2(n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(-)})) \\ &\quad + 2(n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(+)})) + n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \} \quad (4.70) \end{aligned}$$

$$= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \{ n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)})) + n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \} \quad (4.71)$$

を得る。

次に、

$$\frac{1}{2} \langle n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow} \rangle_f \quad (\text{偶のサイト}) = \frac{1}{2} \langle n_{j\downarrow} - n_{j\uparrow} \rangle_f \quad (\text{奇のサイト}) \quad (4.72)$$

$$= \frac{1}{2N} \left(\left\langle \sum_{j:\text{偶}} n_{j\uparrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\uparrow} \right\rangle_f - \left\langle \sum_{j:\text{偶}} n_{j\downarrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\downarrow} \right\rangle_f \right) \quad (4.73)$$

を得る. よって、SDW 秩序変数

$$m = \frac{1}{2N} \left(\left\langle \sum_{j:\text{偶}} n_{j\uparrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\uparrow} \right\rangle_f - \left\langle \sum_{j:\text{偶}} n_{j\downarrow} - \sum_{j:\text{奇}} n_{j\downarrow} \right\rangle_f \right) \quad (4.74)$$

$$= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \langle f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}\uparrow} - f_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle_f \quad (4.75)$$

$$= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\left\{ \frac{(2c_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 d_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 - 2c_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 d_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2) e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} - \frac{(2c_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 d_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 - 2c_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 d_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2)}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right\} \right. \\ \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^+} (f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}\uparrow} - f_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{\mathbf{k}\downarrow})}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right. \\ \left. + \left\{ \frac{(2c_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 d_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 - 2c_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 d_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2) e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} - \frac{(2c_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 d_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 - 2c_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 d_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2)}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right\} \right. \\ \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^-} (f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} + f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}\uparrow} - f_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger f_{\mathbf{k}\downarrow})}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right] \quad (4.76)$$

$$= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \{G^+(\epsilon_{\mathbf{k}}) n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + G^-(\epsilon_{\mathbf{k}}) n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})\} \quad (4.77)$$

を得る. 但し、この計算において

$$G^+(\epsilon_{\mathbf{k}}) \equiv 2c_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 d_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 - 2c_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 d_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 \quad (4.78)$$

$$= \frac{2M}{\sqrt{Z^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}}, \quad (4.79)$$

$$G^-(\epsilon_{\mathbf{k}}) \equiv 2c_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 d_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 - 2c_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 d_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 \quad (4.80)$$

$$= -\frac{2M}{\sqrt{Z^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}} \quad (4.81)$$

を用いた. 結果、

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{M}{\sqrt{Z^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}} \{n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) - n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})\} \quad (4.82)$$

を得る.

反強磁性秩序状態でのスレーブ・ローターの方法における、解くべき自己無撞着方程式を纏めると

$$K = -\frac{2}{N} \langle \cos \theta \rangle_\theta \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij}^{\text{eff}} \quad (4.83)$$

$$= \frac{\langle \cos \theta \rangle_\theta}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\frac{4Z \epsilon_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{Z^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}} \{n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) - n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})\} + 4\epsilon'_{\mathbf{k}} \{n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})\} \right] \quad (4.84)$$

$$\langle \hat{L} \rangle_\theta = 0, \quad (4.85)$$

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{M}{\sqrt{Z^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + M^2}} \{n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) - n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})\} \quad (4.86)$$

となる.

第5章 軌道間交換相互作用を持つ2軌道 Hubbard モデルの定式化

5.1 自己無撞着方程式

軌道 A と軌道 B 間に交換相互作用を導入し、 $t'_A = 0$ を満たす軌道 A においては on-site Coulomb 相互作用を Hartree-Fock 近似により記述し、 $t'_B \neq 0$ を満たす軌道 B においては on-site Coulomb 相互作用をスレーブ・ローターにより記述する。軌道 B のみをスレーブ・ローターにより記述することにより、軌道間の on-site Coulomb 相互作用を除外できる。

ここで、ネスティングが良い Fermi 面を持つ軌道 A の SDW が、スタaggerドな分子場として、ネスティングが悪い Fermi 面を持つ軌道 B に作用し、 B にも SDW が誘起する。(図 5.1 を参照.)

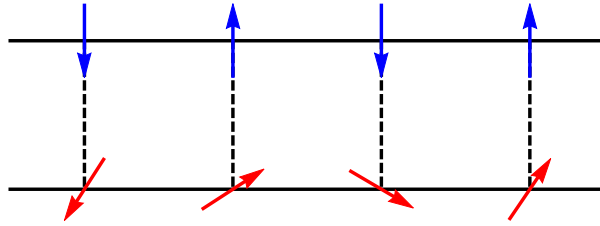


図 5.1: 軌道間交換相互作用. 青の矢印が軌道 A のスピンを表し、赤の矢印が軌道 B のスピンを表す.

絶対零度において、両方の軌道とも、反強磁性秩序 m_A, m_B (SDW 秩序変数) を持つ解の形を仮定する。また、両方の軌道ともハーフフィリングを仮定する。このモデルにおいて、準粒子重み Z , 磁化 m_A, m_B を、与えられた U 毎に自己無撞着に求めることを考える。

軌道間交換相互作用に対し、次の Hartree-Fock 近似を行う。¹

$$H_{\text{int}} = -2J \sum_j \frac{(n_{j\uparrow}^A - n_{j\downarrow}^A)}{2} \frac{(n_{j\uparrow}^B - n_{j\downarrow}^B)}{2} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} &= -2J \sum_j \frac{\langle \Psi_A | n_{j\uparrow}^A - n_{j\downarrow}^A | \Psi_A \rangle}{2} \frac{(n_{j\uparrow}^B - n_{j\downarrow}^B)}{2} - 2J \sum_j \frac{(n_{j\uparrow}^A - n_{j\downarrow}^A)}{2} \frac{\langle \Psi_B | n_{j\uparrow}^B - n_{j\downarrow}^B | \Psi_B \rangle}{2} \\ &\quad + 2J \sum_j \frac{\langle \Psi_A | n_{j\uparrow}^A - n_{j\downarrow}^A | \Psi_A \rangle}{2} \frac{\langle \Psi_B | n_{j\uparrow}^B - n_{j\downarrow}^B | \Psi_B \rangle}{2} \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} &= -J \sum_j (-1)^j m_A (n_{j\uparrow}^B - n_{j\downarrow}^B) - J \sum_j (-1)^j m_B (n_{j\uparrow}^A - n_{j\downarrow}^A) \\ &\quad + 2J m_A m_B N. \end{aligned} \quad (5.3)$$

¹但し、本章と付録 B においては J の値を正に取る。 J の符号を反転させると、軌道 B の SDW 秩序変数 m_B の符号のみが変わり、反転する。

ここで、軌道 A, B の SDW 秩序変数は

$$m_A \equiv \frac{1}{2N} \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} \langle \Psi_A | n_{j\uparrow}^A - n_{j\downarrow}^A | \Psi_A \rangle, \quad (5.4)$$

$$m_B \equiv \frac{1}{2N} \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} \langle \Psi_{f,B} | n_{j\uparrow}^B - n_{j\downarrow}^B | \Psi_{f,B} \rangle, \quad (5.5)$$

により定義される。但し、 $|\Psi_A\rangle, |\Psi_B\rangle$ は、自己無撞着に決定される、それぞれ軌道 A, B の電子、及び準粒子の基底状態である。

この軌道間交換相互作用は H_A に

$$\langle \Psi_{f,B} | H_{\text{int}} | \Psi_{f,B} \rangle = -J \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} m_B (n_{j\uparrow}^A - n_{j\downarrow}^A) \quad (5.6)$$

を加える。この項は、第2章での on-site Coulomb 相互作用の Hartee-Fock 近似での計算に現れた $E_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + m_A^2 U^2}$ を

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + (m_A U + J m_B)^2} \quad (5.7)$$

に変更する。このことにより、第2章の結果から、 m_A の自己無撞着方程式は

$$m_A = \frac{U m_A + J m_B}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_{\mathbf{k},A}^{(-)}) - \theta_H(-E_{\mathbf{k},A}^{(+)})}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + (U m_A + J m_B)^2}} \quad (5.8)$$

となる。但し、軌道 A のエネルギーバンドは

$$E_{\mathbf{k},A}^{(\pm)} = -\mu + \frac{U}{2}(n_A - 1) \pm \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + (U m_A + J m_B)^2} \quad (5.9)$$

であり、 $\theta_H(x)$ は Heaviside 階段関数である。(5.9) において、 $\mu \equiv -\epsilon_0$ (ϵ_0 は (4.1) において定義される) であり、軌道 A の Fermion 数

$$n_A \equiv \frac{1}{N} \sum_j \langle \Psi_A | n_{j\uparrow}^A + n_{j\downarrow}^A | \Psi_A \rangle, \quad (5.10)$$

を使った。この自己無撞着方程式は

$$m_A = \frac{m_A U + J m_B}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - \theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(+)})}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + (m_A U + J m_B)^2}} \quad (5.11)$$

となる。但し、

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) \quad (5.12)$$

と置く。($\epsilon_{\mathbf{k}} \equiv (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})/2$ である.)

一方で、軌道間交換相互作用は H_B に

$$\langle \Psi_A | H_{\text{int}} | \Psi_A \rangle = -J \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} m_A (n_{j\uparrow}^B - n_{j\downarrow}^B) \quad (5.13)$$

を加える。但し、軌道 B のエネルギーバンドは

$$E_{\mathbf{k},B}^{(\pm)} = -\mu - h + Z\epsilon'_{\mathbf{k}} \pm \sqrt{Z^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + J^2 m_A^2} \quad (5.14)$$

であり、 $\epsilon'_k = 4t' \cos k_x \cos k_y$ である。この自己無撞着方程式により、第4章の結果から、 B の自己無撞着方程式は

$$m_B = \frac{Jm_A}{N} \sum_{k \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_k^{(-)}) - \theta_H(-E_k^{(+)})}{\sqrt{Z^2 \epsilon_k^2 + J^2 m_A^2}} \quad (5.15)$$

となる。

よって、

$$m_A = \frac{Um_A + Jm_B}{N} \sum_{k \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_k^{(-)}) - \theta_H(-E_k^{(+)})}{\sqrt{\epsilon_k^2 + (Um_A + Jm_B)^2}}, \quad (5.16)$$

$$m_B = \frac{Jm_A}{N} \sum_{k \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_k^{(-)}) - \theta_H(-E_k^{(+)})}{\sqrt{Z^2 \epsilon_k^2 + J^2 m_A^2}} \quad (5.17)$$

を得る。(5.17) から、 $Z = 0$ のときに $m_B = 0.5$ が従うことが分かる。

ここで、軌道 A のエネルギーバンド (5.9) の右辺の第2項中の $U/2$ は、スレーブ・ローター法の Hamiltonian 中の on-site Coulomb 相互作用項と SDW 平均場理論の Hamiltonian 中の on-site Coulomb 相互作用項との定義の違いに因り、 $n_{j\sigma}^2 = n_{j\sigma}$ に注意すれば (3.9) によって導出できる。ここで、(5.9) と (5.14) とが Fermi エネルギーの定義において両立するのは、本来自明に成立しなければならない余分な条件

$$h = \frac{U}{2}(1 - n_A) \quad (5.18)$$

が成り立つときである。(5.18) の自然な解は $h = 0$ かつ $n_A = 1$ のときであり、これは A が絶縁化することにより、系のハーフフィリングの条件が軌道 B のハーフフィリングの条件と等価になり ($n_A = 1$)、更に軌道 B がハーフフィリングである ($h = 0$) ときである。よって、本章の2軌道モデルにおける解析は、軌道 A が絶縁化する最小の U/t の値以上の (軌道 A が絶縁化した後での) U/t の領域に限る。

2軌道モデルにおける、自己無撞着方程式を纏めると

$$\phi_A \equiv \sum_{k \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_{k,A}^{(-)}) - \theta_H(-E_{k,A}^{(+)})}{\sqrt{\epsilon_k^2 + (Um_A + Jm_B)^2}}, \quad (5.19)$$

$$\phi_B \equiv \sum_{k \in \text{RBZ}} \frac{\theta_H(-E_{k,B}^{(-)}) - \theta_H(-E_{k,B}^{(+)})}{\sqrt{Z^2 \epsilon_k^2 + J^2 m_A^2}}, \quad (5.20)$$

$$\psi \equiv \sum_{k \in \text{RBZ}} \frac{[\theta_H(-E_{k,B}^{(-)}) - \theta_H(-E_{k,B}^{(+)})](Z\epsilon_k^2)}{\sqrt{Z^2 \epsilon_k^2 + J^2 m_A^2}}, \quad (5.21)$$

$$\eta \equiv \sum_{k \in \text{RBZ}} \epsilon'_k [\theta_H(-E_{k,B}^{(+)}) + \theta_H(-E_{k,B}^{(-)})] \quad (5.22)$$

と置くことにより

$$m_A = \frac{Um_A + Jm_B}{N} \phi_A, \quad (5.23)$$

$$m_B = \frac{Jm_A}{N} \phi_B, \quad (5.24)$$

$$K = -4 \langle \cos \theta \rangle_\theta \left(\frac{\psi}{N} - \frac{\eta}{N} \right), \quad (5.25)$$

$$\langle \hat{L} \rangle_\theta = 0 \quad (5.26)$$

となる。但し、軌道 B のハーフフィリングの条件から $h = 0$ となり、1 サイト (ユニットセル) 自由度あたり

$$H_\theta = \frac{U}{2} \hat{L}^2 + K \cos \theta \quad (5.27)$$

である。

5.2 結果と考察

以上の自己無撞着方程式を $t'_A = 0$, $t'_B/t = 0.2$ かつ $2J/t = 2, 1.5, 1, 0.5$ のときに、数値的に解いた結果が次の図 5.2, 図 5.3 である。

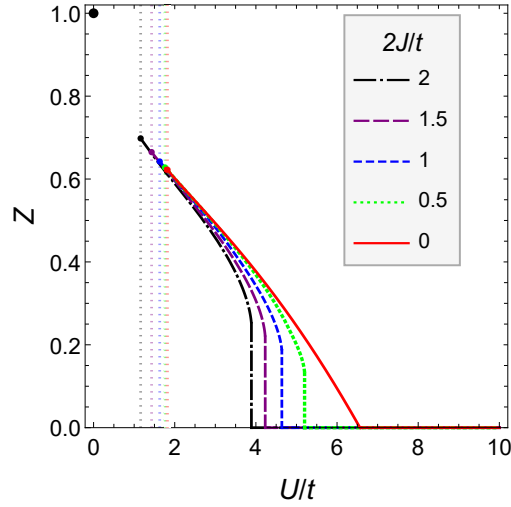


図 5.2: A が絶縁化した後における U/t に対する、自己無撞着方程式の解としての Z . $2J/t = 2, 1.5, 1, 0.5$, 及び 0 , $t_A = t_B = 1$, $t'_A = 0$, 及び $t'_B = 0.2$ かつハーフフィリングのとき。

軌道 A は、ある臨界値 $U_{\text{cr}}^{(0)}/t$ 以上の U/t において絶縁化する。Mott 転移はある臨界値 $U_{\text{cr}}^{(1)}/t$ において起こり、 Z が 0 となっている。 $2J \neq 0$ では Mott 転移は 1 次転移であり、 $2J = 0$ では 2 次転移である。この Mott 転移の臨界値 $U_{\text{cr}}^{(1)}/t$ は、 $2J = 0$ のときより、 $2J/t$ の値が大きい程減少する。図 5.3 において、重要な目印として、ある値 $U_{\text{cr}}^{(2)}/t$ において $(U/t) - m_B$ グラフが折れ曲がっており、この値において B の Fermi 面が消滅している。(図 5.4 を参照。) つまり、軌道 B は強相関効果の下で、Mott 転移以前に絶縁化する。軌道 A は $U_{\text{cr}}^{(0)}/t$ において絶縁化するが、その値は $U_{\text{cr}}^{(2)}/t$ の値よりも低い。つまり、両軌道を合わせた系は $U_{\text{cr}}^{(2)}/t$ において絶縁化し、それは Mott 転移が起こる $U_{\text{cr}}^{(1)}/t$ 以前である。ここで、 $U_{\text{cr}}^{(0)}/t$ が $U_{\text{cr}}^{(2)}/t$ よりも低い物理的理由は、 A の Fermi 面のネスティングが B のそれよりも良いことであると考えられる。 $2J/t$ の値が増加すると、 $U_{\text{cr}}^{(2)}/t$ は強相関効果の下で著しく減少する。

図 5.5 に、Mott 転移の臨界値 $U_{\text{cr}}^{(1)}/t$ と、系の絶縁化の臨界値 $U_{\text{cr}}^{(2)}/t$ の $2J/t$ 依存性を示す。軌道 B の第 2 最隣接サイト間ホッピングパラメータ t'_B の値を $t'_B/t = 0.1, 0.2, 0.3$ により与えている。

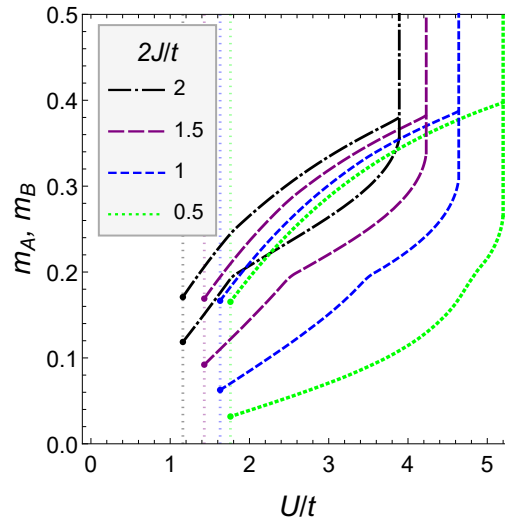


図 5.3: A が絶縁化した後における U/t に対する、自己無撞着方程式の解としての m_A, m_B . $2J/t = 2, 1.5, 1, 0.5$, 及び 0 , $t_A = t_B = 1$, $t'_A = 0$, 及び $t'_B = 0.2$ かつハーフフィリングのとき. $Z = 0$ において、 m_B は 0.5 となるが、 m_A はならない.

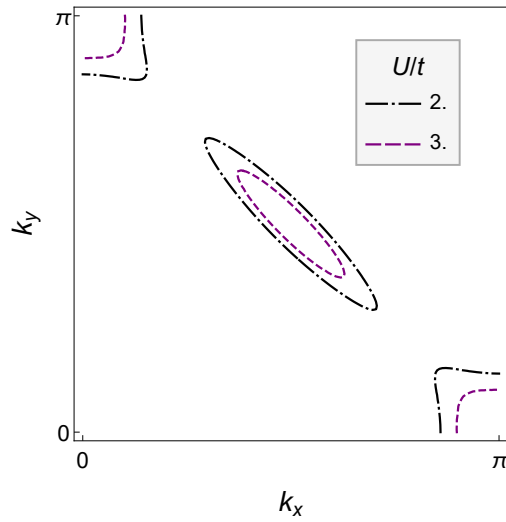


図 5.4: BZ の第 1 象限における軌道 B の Fermi 面. $t_A = t_B = 1$, $t'_A = 0$, $t'_B = 0.2$, かつ $2J/t = 1$, $U/t = 2.0$ 及び 3.0 の場合を図示する. B の Fermi 面は $U_{\text{cr}}^{(2)}/t \approx 3.50$ において消滅する.

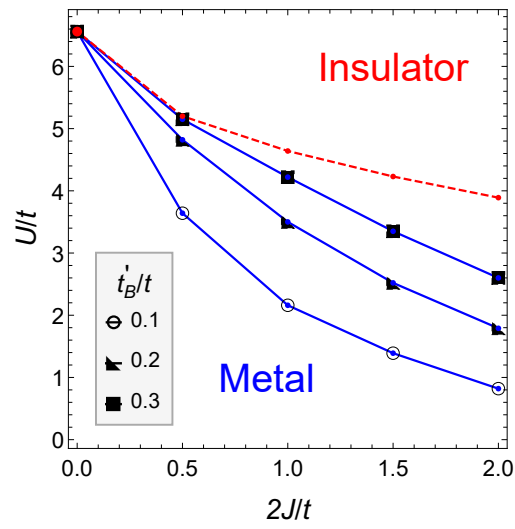


図 5.5: Mott 転移 ($U_{\text{cr}}^{(1)}/t$: 赤の破線) と金属-絶縁体転移 ($U_{\text{cr}}^{(2)}/t$: $t'_B/t = 0.1, 0.2$, 及び 0.3 について、青の実線) の U/t の臨界値の $2J/t$ 依存性を示す. それぞれの t'_B/t について、青の実線は金属相と絶縁体相を分離している. この図は本研究の主結果である.

第6章 結論

本研究において、磁性有機導体 λ -(BETS) $_2$ FeCl $_4$ の温度相図を説明するシナリオを、単純化したモデルにおいて得ることを試みた。

当該物質は以下の特徴を持つ。

- (1) on-site Coulomb 相互作用による強相関の電子系である。
- (2) 電気伝導を担う各ダイマー超分子 (BETS) $_2$ は、Fermi エネルギー近傍において 2 つの軌道 (バンド) をハーフフィリングしており、当該物質はハーフフィリングの系である。
- (3) 当該物質の Fermi 面には、ネスティングが完全に近いものと、不完全なものとが 1 つずつ存在する。
- (4) 温度相図は、低温である $T_{\text{MI}} = 8.3$ [K] より上においては常磁性金属であり、それ以下の温度においては反強磁性絶縁体となる。

これらの内、(1), (2), (3) に、まず合致するモデルの候補として、2 軌道 (バンド) 2 次元, ハーフフィリング, t - t' - U Hubbard モデルにおいて、Fermi 面のネスティングが良い軌道 A と Fermi 面のネスティングが悪い軌道 B とが交換相互作用しているモデルを考案した。但し、ネスティングの完全性は、 t' の値を調節することにより決めた。1 軌道における数値計算では、 $t' = 0$ のときにネスティングは完全であり、 t' を 0 からずらす程ネスティングによる SDW 状態は伝導バンド幅を狭めても生じにくくなった。(図 2.7 を参照.)

このときに、軌道 A の基底状態に SDW 状態による反強磁性秩序が生成したときに、もう一方の軌道 B に対し、軌道間交換相互作用はスタaggerドな分子場との相互作用の役割を果たす。

尚、軌道 A の解析には on-site Coulomb 相互作用について Hartree-Fock 近似を適用し、軌道 B の解析の際には S. Florens と A. Georges により提案されたスレーブ・ローターの方法を用いた。(このことにより、軌道間の on-site Coulomb 相互作用を除外できる。) 結果、絶対零度において、自己無撞着方程式を解くことにより、軌道 B の反強磁性秩序が完全となったときに軌道 B のバンド幅がゼロとなった。実際には、金属-絶縁体転移に関して、軌道 B において、強相関効果によるバンド絶縁化が Mott 転移よりも先行して実現した。

このモデルにおいて、(4) については、軌道間交換相互作用を入れないときに比べて入れたときの方が、SDW 状態となっている軌道 A が生成するスタaggerドな分子場により、ひきずられる形で軌道 B にも SDW 状態が起こり、軌道 B の金属-絶縁体転移点 $U_{\text{cr}}^{(2)}/t$ の値が著しく下がることが分かった。このことにより、(4) を定性的に説明する金属-絶縁体転移の描像を提案した。

ここで、軌道間交換相互作用は、軌道間ホッピングを摂動とした 2 次の摂動による超交換相互作用として得られ、このとき良く知られている公式 $2J = -4t^2/U$ により評価できる。[29] 但し、軌道 A, B 間のホッピングの強さと t とを同一視した。通常の有機導体においては $U/t = 4$ 程度であり [14]、このとき $(2|J|/t, U/t) = (1, 4)$ を得る。図 5.5 から、この値点は金属-絶縁体転移点曲線において $0.2 < t'_B/t < 0.3$ に位置し、軌道 B のネスティングが高度に悪い場合にも本研究の金属-絶縁体転移の機構が成立することが分かる。

以下、本研究における課題を挙げる。

まず、本研究においては当該物質の基本的な特徴を満たす単純化したモデルを研究したが、当該物質が持つ実際のバンド構造を用いた解析が当然課題となる。当該物質における BETS 分子系の実際のホッピングネットワークは、我々のモデルよりも複雑であり対称性も低い。しかし、我々の核となる議論は Fermi 面のネスティング構造からの応答に根ざしているので、我々の結果は本質的な変更は受けないと予想できる。

次に、実験での温度相図と理論とを対応させるためには、基底状態の解析だけでなく、熱揺らぎを取り入れた有限温度での解析を行う必要がある。この点について、本研究において得られた金属-絶縁体転移の描像から、以下のような、実験事実を説明しうる有限温度での相転移のシナリオが推測される。まず、系を冷却してゆくと、on-site Coulomb 相互作用の効果により、低温 $T_N > 0$ において SDW 状態による反強磁性秩序が生じる。次に、我々の金属-絶縁体転移の描像により、ほぼ同時に、つまり有限温度 $T_{MI} \lesssim T_N$ において SDW 状態の金属相から SDW 状態の絶縁体相へと転移する。

最後に、本研究では、金属-絶縁体転移の説明を目標としており、特に当該物質が持つ (3) の特徴に着目していたため、アニオン分子の層における大きさ $5/2$ の Fe スピンと、ドナー分子 BETS の層における伝導電子のスピンとの間の π - d 相互作用を無視したが、より正確なモデルを構成する際には吟味する必要がある。この必要性は、 λ -(BETS) $_2$ Fe $_x$ Ga $_{1-x}$ Cl $_4$ の温度相図において、Fe の反強磁性転移及び金属-絶縁体転移への寄与が小さくないことから分かる。実際に、Hubbard モデルを π - d 相互作用の近藤格子に拡張したモデルにおいて、Néel 温度 $T_N(x)$ に対し、 $T_N(x) \propto x$ が理論的に導出されている。[15, 30] つまり、Fe の Ga への置換が反強磁性転移を抑制する。 π - d 相互作用は伝導 π 電子の SDW 状態を安定化させることから [30]、絶対零度における U/t の金属-絶縁体転移点は π - d 相互作用を考慮することにより更に下がると期待される。

付 録 A 1 軌道 Hubbard モデルにおける Fermi エネルギーの定義

ハーフフィリングの 1 軌道 Hubbard モデルにおける Fermi エネルギーを定義する.

A.1 Fermion 数を用いた定義

第 2 章において扱った SDW 平均場理論を考える.

(2.28) に対応するエネルギー固有状態を

$$E = E_{\mathbf{k}}^{(+)} : \{|e_{\mathbf{k}}^{+,1}\rangle, |e_{\mathbf{k}}^{+,2}\rangle\}, \quad (\text{A.1})$$

$$E = E_{\mathbf{k}}^{(-)} : \{|e_{\mathbf{k}}^{-,1}\rangle, |e_{\mathbf{k}}^{-,2}\rangle\} \quad (\text{A.2})$$

と記す. $|e_{\mathbf{k}}^{\pm,i}\rangle$ を 1 粒子状態に持つ消滅演算子を、 $e_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$ と記す. ここで、

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = c_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{+,1} + c_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{-,1}, \quad (\text{A.3})$$

$$c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} = d_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{+,1} + d_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1 e_{\mathbf{k}}^{-,1}, \quad (\text{A.4})$$

$$c_{\mathbf{k}\downarrow} = c_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{+,2} + c_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{-,2}, \quad (\text{A.5})$$

$$c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} = d_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{+,2} + d_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2 e_{\mathbf{k}}^{-,2} \quad (\text{A.6})$$

と展開する. これらの展開式及び、数演算子 $n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$ と、その Fock 空間 $\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$ ($\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{\pm} \equiv \bigoplus_i \mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{\pm,i}$) に対して成り立つ

$$n_{\mathbf{k}}^{\pm,i} \equiv e_{\mathbf{k}}^{\pm,i\dagger} e_{\mathbf{k}}^{\pm,i}, \quad (\text{A.7})$$

$$(n_{\mathbf{k}}^{\pm,i})^2 = n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}, \quad (\text{A.8})$$

$$\exp(-\beta E_{\mathbf{k}}^{\pm} n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}) = e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{\pm}} n_{\mathbf{k}}^{\pm,i} + (1_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{\pm,i}} - n_{\mathbf{k}}^{\pm,i}) \quad (\text{A.9})$$

を使って、fermion 数を計算すると

$$n = \langle n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} \rangle \quad (\text{A.10})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_j \langle c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \rangle \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \rangle \quad (\text{A.12})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \text{tr} \{ (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \frac{\exp(-\sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \sum_i \beta(E_{\mathbf{k}}^{(+)} n_{\mathbf{k}}^{+,i} + E_{\mathbf{k}}^{(-)} n_{\mathbf{k}}^{-,i}))}{\text{tr}(\exp(-\sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \sum_i \beta(E_{\mathbf{k}}^{(+)} n_{\mathbf{k}}^{+,i} + E_{\mathbf{k}}^{(-)} n_{\mathbf{k}}^{-,i}))}) \} \quad (\text{A.13})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \left[\sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} - \frac{(|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2)}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right\} \right. \\ \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{+}}(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma})}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(+)}}} \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{(|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} - \frac{(|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2)}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right\} \right. \\ \left. + \frac{\text{tr}_{\mathcal{V}_{\mathbf{k}}^{-}}(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma})}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}^{(-)}}} \right] \quad (\text{A.14})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \{ 2(n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) - n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(+)})) + 2(n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) - n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(-)})) \\ + 2(n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(-E_{\mathbf{k}}^{(-)})) \} \quad (\text{A.15})$$

$$= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \{ n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)}) \} \quad (\text{A.16})$$

を得る。但し、この計算において、第 4 章でも述べた非自明な計算結果

$$\sum_{\sigma} \sum_{i=1}^2 (|c_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{+, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) = |c_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 + |c_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 + |d_{+, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 + |d_{+, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 \quad (\text{A.17})$$

$$= 2, \quad (\text{A.18})$$

$$\sum_{\sigma} \sum_{i=1}^2 (|c_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2 + |d_{-, \mathbf{k}\sigma}^i|^2) = |c_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 + |c_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 + |d_{-, \mathbf{k}\uparrow}^1|^2 + |d_{-, \mathbf{k}\downarrow}^2|^2 \quad (\text{A.19})$$

$$= 2 \quad (\text{A.20})$$

を用いた。

ここで、ハーフフィリングの条件 ($n = 1$) により

$$1 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} [n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})] \quad (\text{A.21})$$

を得る。この条件の絶対零度における式

$$1 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} [\theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + \theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(-)})] \quad (\text{A.22})$$

が fermion 数を用いた Fermi エネルギーの定義である。ここで、波数ベクトルについての和の領域が、BZ ではなく、その半分の RBZ であることに注意する。

A.2 自由エネルギー J を用いた定義

第2章において調べた反強磁性秩序状態での Hubbard モデルにおいて、大分配関数 Ξ について自由エネルギー J を定義した。このときに、 J の熱力学的関係式に対応した、大正準集団における化学ポテンシャルの定義

$$Nn = -\frac{\partial J}{\partial \mu} \quad (\text{A.23})$$

を代わりに用いることが出来る。

ここで、

$$\frac{\partial J}{\partial \mu} = -2 \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} [n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})] \quad (\text{A.24})$$

であるので、ハーフフィリングの条件 ($n = 1$) により

$$1 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} [n_F(E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + n_F(E_{\mathbf{k}}^{(-)})] \quad (\text{A.25})$$

を得る。この条件の絶対零度における式

$$1 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} [\theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(+)}) + \theta_H(-E_{\mathbf{k}}^{(-)})] \quad (\text{A.26})$$

が Fermi エネルギーの定義であり、fermion 数を用いた定義と合致する。ここでも、波数ベクトルについての和の領域が、BZ ではなく、その半分の RBZ であることに注意する。

付 録 B 補足の数値計算結果

第 5 章における補足的な数値計算の結果を示す.

B.1 軌道 A, B の Fermi 面

軌道 A, B の Fermi 面を、2 軌道モデルにおいて、 $U/t = J/t = 0$ 及びハーフフィリングのときに、 $t'_A = 0$ かつ、 $t'_B/t = 0.1, 0.2$, 及び 0.3 のときに図 B.1 に示す.

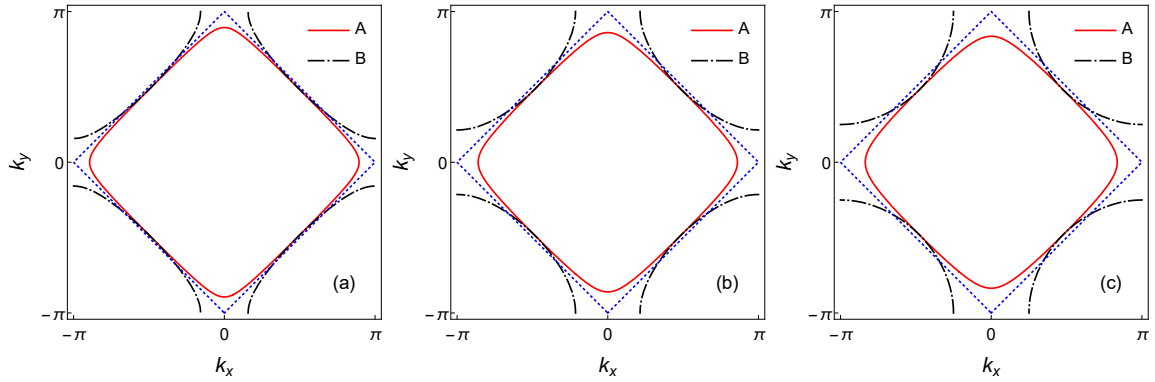


図 B.1: 軌道 A, B の Fermi 面. 2 軌道モデルにおいて、 $U/t = J/t = 0$ 及びハーフフィリングのときに、 $t'_A = 0$ かつ、 $t'_B/t = 0.1$: (a), 0.2 : (b), 及び 0.3 : (c) の場合を示す. 点線の補助線 $|k_x + k_y| = \pi$ も図示した.

B.2 $t'_A = 0$, $t'_B/t = 0.1, 0.3$ のときの数値計算結果

以下、 $t'_A = 0$, $t'_B/t = 0.1, 0.3$ のときの自己無撞着方程式の解を図 B.2, B.3 に示す.

この数値計算の結果から顕著な点を 3 つ読み取ることが出来る.

第一に、 Z についての結果は、共通の U/t の値においては、 t'_B/t の値を $0.1, 0.2, 0.3$ と変えても殆ど変わらない.

第二に、 $t'_B/t = 0.2$ のときと同様に、 $(U/t) - m_B$ のグラフが折れ曲がる U/t の値において軌道 B の Fermi 面がなくなり、軌道 B が絶縁化する.

第三に、 t'_B/t の値を小さくし、軌道 B の Fermi 面のネスティングを良くする程、軌道 B、つまり系、が絶縁化する U/t の値は小さくなることが判った. (図 5.5 を参照.)

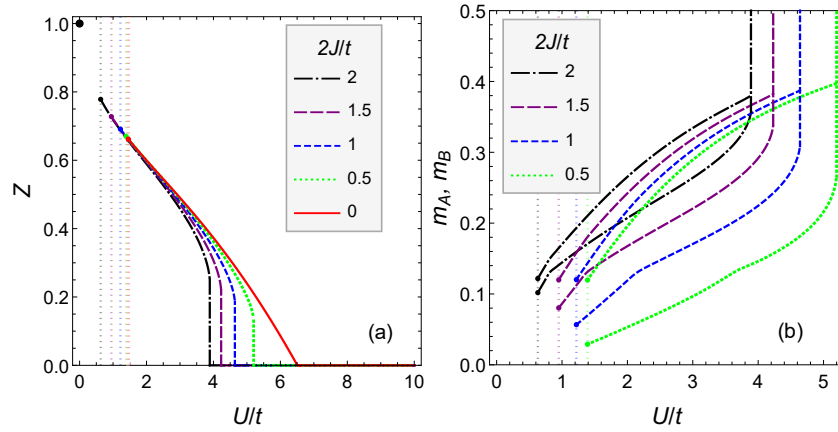


図 B.2: 軌道 A が絶縁化した後での U/t に対する、 $t'_A = 0$, $t'_B/t = 0.1$ での自己無撞着方程式の解. $2J/t = 2, 1.5, 1, 0.5$, 及び 0 , $t_A = t_B = 1$, $t'_A = 0$, 及び $t'_B = 0.3$ かつハーフフィリングとした. (a): Z の解. (b): m_A と m_B の解. $Z = 0$ において、 m_B は 0.5 となるが、 m_A はならない.

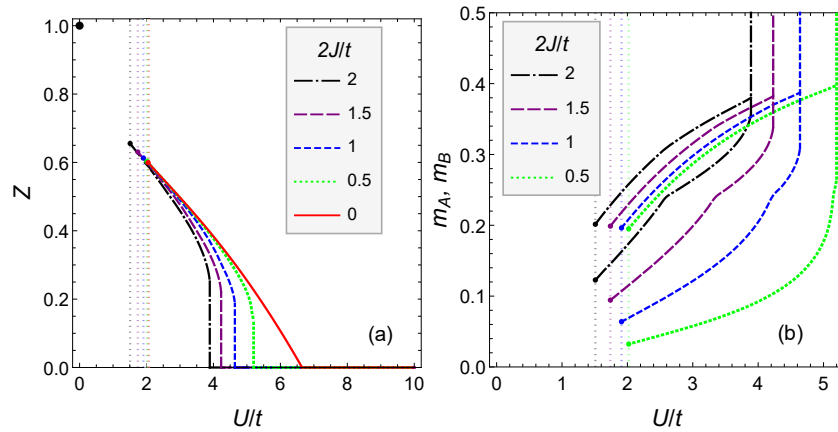


図 B.3: 軌道 A が絶縁化した後での U/t に対する、 $t'_A = 0$, $t'_B/t = 0.3$ での自己無撞着方程式の解. $2J/t = 2, 1.5, 1, 0.5$, 及び 0 , $t_A = t_B = 1$, $t'_A = 0$, 及び $t'_B = 0.3$ かつハーフフィリングとした. (a): Z の解. (b): m_A と m_B の解. $Z = 0$ において、 m_B は 0.5 となるが、 m_A はならない.

付 録 C Anderson モデルのスレーブ・ローター理論による解析

本章では、スレーブ・ローターの方法を、3.2 節において説明した原子極限よりも高度な具体例として、金属に添加された磁性不純物を記述する **Anderson モデル** に適応する。本章は Ref.[25] の計算をフォローした付録である。

C.1 スレーブ・ローター

Anderson モデルのハミルトニアンは

$$H = H_{\text{at}} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + h.c.) \quad (\text{C.1})$$

$$= \left[\frac{U}{2} \hat{L}^2 + \epsilon_0 \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right] + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} e^{-i\theta} + h.c.) \quad (\text{C.2})$$

である。 $c_{\mathbf{k}\sigma}, d_{\sigma}$ はそれぞれ、 s 電子 (伝導電子) と d 電子の消滅演算子である。 (C.2) において、第 1 項が、同一サイト (不純物原子) に 2 つの d 電子がいるときの Coulomb 反発を、第 2 項が、各サイトにエネルギー ϵ_0 を持つ d 電子が局在したときのエネルギーを、第 3 項が、波数ベクトル $\mathbf{k}$ 、状態 σ 、エネルギー $\epsilon_{\mathbf{k}}$ の s 電子の系のエネルギーを、最後の項が、局在した d 電子と s 電子との混成を表す。

このモデルにスレーブ・ローターの方法を適応して、 $H + hC$ は

$$H_f^{\text{eff}} = (\epsilon_0 - h) \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\text{eff}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + h.c.), \quad (\text{C.3})$$

$$H_{\theta}^{\text{eff}} = \frac{U}{2} \hat{L}^2 + h \hat{L} + K \cos \theta \quad (\text{C.4})$$

の和に帰着する。但し、新たに導入した平均場についての自己無撞着方程式

$$V_{\text{eff}} = V \langle \cos \theta \rangle_{\theta}, \quad (\text{C.5})$$

$$K = V \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + f_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_f \quad (\text{C.6})$$

及び、拘束条件についての自己無撞着方程式

$$\langle \hat{L} \rangle_{\theta} = N_c \left[n_F(\epsilon_0 - h) - \frac{1}{2} \right] \quad (\text{C.7})$$

が課される。

この $H + hC$ の、平均場 (C.5), (C.6) を用いた、 H_f^{eff} と H_{θ}^{eff} との和への分離が可能になるためには、 $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle_f$ と $\langle e^{i\theta} \rangle_{\theta}$ は共に**実数**であると仮定している。つまり、

$$\text{仮定: } \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle_f = \text{実数}, \quad \langle e^{i\theta} \rangle_{\theta} = \langle \cos \theta \rangle_{\theta} \quad (\text{C.8})$$

である.

C.2 自己無撞着方程式の解析

以下、

$$\text{前提: } \epsilon_0 = 0, \quad Q = \frac{N_c}{2} \quad (\text{C.9})$$

のときを例として、自己無撞着方程式を解析する. このとき、(C.7) の解として $h = 0$ を得る.

この例での、スレーブ・ローターの θ 表示の波動関数 $\Psi(\theta)$ が満たす波動方程式は

$$\left[-\frac{U}{2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + K \cos \theta \right] \Psi(\theta) = E \Psi(\theta) \quad (\text{C.10})$$

である. 以下、 $K \neq 0$ として、 $K \cos \theta$ を摂動エネルギー項とみなす.

まず、摂動を加える前、つまり、 $K = 0$ のときに、基底状態は $|\ell = 0\rangle$ である. $\langle \theta | \ell \rangle = e^{i\ell\theta}$ により、この基底状態の波動関数は $[0, 2\pi]$ で一定となる.

次に、 $K \neq 0$ のとき、基底状態の波動関数は、1 次のエネルギー摂動において

$$|\Psi_0^{(1)}\rangle = |0\rangle + \sum_{\ell \neq 0} \frac{\langle \ell | K \cos \theta | 0 \rangle}{E_0 - E_\ell} |\ell\rangle \quad (\text{C.11})$$

となる. 但し、 $\langle \theta | \ell \rangle = e^{i\ell\theta}$ 及び

$$E_\ell = U \frac{\ell^2}{2} + h\ell, \quad h = 0 \quad (\text{C.12})$$

$$= U \frac{\ell^2}{2} \quad (\text{C.13})$$

である. 特に、 $E_0 = 0$, $E_{\pm 1} = U/2$ である.

よって、

$$\langle \cos \theta \rangle_\theta \equiv \langle \Psi_0^{(1)} | \cos \theta | \Psi_0^{(1)} \rangle \quad (\text{C.14})$$

$$= \langle 0 | \cos \theta | 0 \rangle + 2K \sum_{\ell \neq 0} \frac{|\langle 0 | \cos \theta | \ell \rangle|^2}{E_0 - E_\ell} + \mathcal{O}(K^2) \quad (\text{C.15})$$

$$= 2K \sum_{\ell \neq 0} \frac{|\langle 0 | \cos \theta | \ell \rangle|^2}{E_0 - E_\ell} \quad (\because \langle 0 | \cos \theta | 0 \rangle = \frac{\langle 0 | 1 \rangle + \langle 0 | -1 \rangle}{2} = 0) \quad (\text{C.16})$$

$$= -2K \sum_{\ell \neq 0} \frac{|\langle 0 | \cos \theta | \ell \rangle|^2}{E_\ell} \quad (\because E_0 = 0) \quad (\text{C.17})$$

$$= -2K \sum_{\ell \neq 0} \frac{|\langle 0 | (e^{i\theta} + e^{-i\theta})/2 | \ell \rangle|^2}{E_\ell} \quad (\text{C.18})$$

$$= -2K \left[\frac{(\langle 0 | 0 \rangle / 2)^2}{E_{-1}} + \frac{(\langle 0 | 0 \rangle / 2)^2}{E_1} \right] \quad (\because e^{\pm i\theta} | \mp 1 \rangle = | 0 \rangle) \quad (\text{C.19})$$

$$= -2K \left[\frac{1/4}{U/2} + \frac{1/4}{U/2} \right] \quad (\because E_{\pm 1} = \frac{U}{2}) \quad (\text{C.20})$$

$$= -\frac{2K}{U} \quad (\text{C.21})$$

$$= \frac{V_{\text{eff}}}{V} \quad (\because \text{自己無撞着方程式 (C.5)}) \quad (\text{C.22})$$

を得る. この結果により、重要な関係式

$$K = -U \frac{V_{\text{eff}}}{2V} \quad (\text{C.23})$$

を得る.

以下、(C.23) を用いて書き換えられた自己無撞着方程式

$$V_{\text{eff}} = -\frac{2V^2}{U} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_f \quad (\text{C.24})$$

を計算によって更に書き換えてから解き、準粒子 f の Green 関数を決定する.

Georges-Kotliar に従って、 s 電子と準粒子 f との混成と、 s 電子の状態密度とを併せた量

$$\Gamma_{\text{eff}}(\epsilon) \equiv \pi V_{\text{eff}}^2 \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (\text{C.25})$$

$$= \pi V_{\text{eff}}^2 D_s(\epsilon) \quad (\text{C.26})$$

を導入する.[31] 更に、 s 電子の状態密度 $D_s(\epsilon)$ を、 $[-\Lambda, \Lambda]$ にのみゼロでなく、そこで平坦なものとする

$$\Gamma_{\text{eff}} = \frac{\pi V_{\text{eff}}^2}{2\Lambda} \quad (\because D_s(\epsilon) = \frac{1}{2\Lambda}) \quad (\text{C.27})$$

を得る.

準粒子 f の Green 関数は、時間 $1/\Gamma_{\text{eff}}$ を不純物原子によるトラップによる準粒子 f の寿命として

$$G_f^{-1}(\omega + i0^+) = (\omega - \epsilon_0) + i\Gamma_{\text{eff}}, \quad \epsilon_0 \equiv 0 \quad (\text{C.28})$$

$$= \omega + i\Gamma_{\text{eff}} \quad (\text{C.29})$$

となる. 以下、この式を導出する.

((C.28) の導出): Green 関数 G は演算子として

$$G = \frac{1}{\omega - H_f^{\text{eff}}} \quad (\text{C.30})$$

であり、その行列要素の内、準粒子 f の状態 $|f\rangle$ と、波数ベクトル $\mathbf{k}$ の s 電子の状態 $|\mathbf{k}\rangle$ について

$$G_f = \langle f|G|f\rangle, \quad (\text{C.31})$$

$$G_{\mathbf{k}f} = \langle \mathbf{k}|G|f\rangle \quad (\text{C.32})$$

と置けば

$$(\omega - H_f^{\text{eff}})G = 1 \quad (\text{単位行列}) \quad (\text{C.33})$$

により、この式の、 (f, f) 成分と、 $(\mathbf{k}, f)$ 成分を見れば

$$\langle f|\omega - H_f^{\text{eff}}|f\rangle G_f + \langle f|\omega - H_f^{\text{eff}}|\mathbf{k}\rangle G_{\mathbf{k}f} = 1 \quad (\because \text{対角成分}), \quad (\text{C.34})$$

$$\langle \mathbf{k}|\omega - H_f^{\text{eff}}|f\rangle G_f + \langle \mathbf{k}|\omega - H_f^{\text{eff}}|\mathbf{k}\rangle G_{\mathbf{k}f} = 0 \quad (\because \text{非対角成分}) \quad (\text{C.35})$$

を得る. つまり、

$$(\omega - \epsilon_0)G_f - V_{\text{eff}} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}f} = 1, \quad (\text{C.36})$$

$$-\bar{V}_{\text{eff}}G_f + (\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})G_{\mathbf{k}f} = 0 \quad (\text{C.37})$$

を得る. (C.37) により

$$G_{\mathbf{k}f} = \frac{\bar{V}_{\text{eff}}}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}} G_f \quad (\text{C.38})$$

を得るので、これを (C.36) に代入して

$$(\omega - \epsilon_0)G_f = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\text{eff}}|^2}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}} G_f + 1 \quad (\text{C.39})$$

つまり、解

$$G_f = \frac{1}{\omega - \epsilon_0 - \sum_{\mathbf{k}} |V_{\text{eff}}|^2 / (\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})} \quad (\text{C.40})$$

を得る. 以下、この G_f の表式の分母の第 3 項を計算すると

$$|V_{\text{eff}}|^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}} = |V_{\text{eff}}|^2 \int d\omega' \frac{D_s(\omega')}{\omega - \omega' + i0^+} \quad (\because D_s(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})) \quad (\text{C.41})$$

$$= |V_{\text{eff}}|^2 \int d\omega' \frac{D_s(\omega')}{\omega - \omega'} - |V_{\text{eff}}|^2 \int d\omega' i\pi \delta(\omega - \omega') D_s(\omega') \quad (\text{C.42})$$

$$(\because \frac{1}{\omega + i0^+} = P\left(\frac{1}{\omega}\right) - i\pi\delta(\omega)) \quad (\text{C.43})$$

$$= |V_{\text{eff}}|^2 \int_{-\Lambda}^{\Lambda} d\omega' \frac{1}{(\omega - \omega')2\Lambda} - i\pi |V_{\text{eff}}|^2 D_s(\omega) \quad (\text{C.44})$$

$$= \frac{|V_{\text{eff}}|^2}{2\Lambda} \ln \frac{\omega - \Lambda}{\omega + \Lambda} - i\pi |V_{\text{eff}}|^2 D_s(\omega) \quad (\text{C.45})$$

$$= -i\pi |V_{\text{eff}}|^2 D_s(\omega) \quad (\text{C.46})$$

$$= -i\Gamma_{\text{eff}} \quad (\text{C.47})$$

を得る. (C.46) を導くステップで、 Λ が非常に大きい値であると仮定し、

$$\frac{1}{x} \ln \frac{1-x}{1+x} = -\frac{2}{x^2} + i\frac{\pi}{x} \quad (x \gg 1) \quad (\text{C.48})$$

を用いた. よって結果、求める式

$$G_f(\omega + i0^+) = \frac{1}{\omega - \epsilon_0 + i\Gamma_{\text{eff}}}, \quad \epsilon_0 = 0 \quad (\text{C.49})$$

を得る. ((C.28) の導出終わり.)

この結果 (C.28) を用いれば、準粒子 f の状態密度は

$$D_f(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_f(\omega) \quad (\text{C.50})$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\omega + i\Gamma_{\text{eff}}} \right] \quad (\text{C.51})$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{\omega - i\Gamma_{\text{eff}}}{\omega^2 + \Gamma_{\text{eff}}^2} \right] \quad (\text{C.52})$$

$$= \frac{\Gamma_{\text{eff}}/\pi}{\omega^2 + \Gamma_{\text{eff}}^2} \quad (\text{C.53})$$

$$= \frac{V_{\text{eff}}^2}{2\Lambda} \frac{1}{\omega^2 + (V_{\text{eff}}^2 \pi / (2\Lambda))^2} \quad (\text{C.54})$$

となる.

この状態密度の表式を用いれば、自己無撞着方程式 (C.24) を

$$1 = -\frac{2V^2}{UV_{\text{eff}}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_f \quad (\text{C.55})$$

$$= -\frac{2V^2}{UV_{\text{eff}}} \left[\frac{2N_c}{V_{\text{eff}}} \int_{-\Lambda}^0 d\omega D_f(\omega) \omega \right] \quad (\because \epsilon_0 = h = 0) \quad (\text{C.56})$$

$$= -N_c \frac{2V^2}{U\Lambda} \int_{-\Lambda}^0 d\omega \frac{\omega}{\omega^2 + (V_{\text{eff}}^2 \pi / (2\Lambda))^2} \quad (\text{C.57})$$

と書き換えられる. ここで、積分公式

$$\int_{-\Lambda}^0 \frac{x}{x^2 + y/\Lambda^2} dx = \frac{1}{2} (\ln(y) - \ln(\Lambda^4 + y)), \quad x = \omega, \quad y = \frac{\pi^2 V_{\text{eff}}^4}{4} \quad (\text{C.58})$$

$$= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\Lambda^4}{y} + 1 \right), \quad \Lambda^4 \gg y \quad (\because \Lambda^2 \gg \Gamma^2) \quad (\text{C.59})$$

$$\approx -\ln \left(\frac{\Lambda^2}{\sqrt{y}} \right) \quad (\text{C.60})$$

を用いて、 $\Lambda \gg U \gg \Gamma$ に対し

$$1 = N_c \frac{2V^2}{U\Lambda} \ln \left(\frac{2\Lambda^2}{\pi V_{\text{eff}}^2} \right) \quad (\text{C.61})$$

を得る.

この結果により、自己無撞着方程式の解として

$$\Gamma_{\text{eff}} \equiv \frac{\pi V_{\text{eff}}^2}{2\Lambda} \quad (\text{C.62})$$

$$= \Lambda \exp \left(-\frac{U\Lambda}{2N_c V^2} \right) \quad (\because (\text{C.61})) \quad (\text{C.63})$$

$$= \Lambda \exp \left(-\frac{\pi U}{4N_c \Gamma} \right) \quad (\because \Gamma \equiv \frac{\pi V^2}{2\Lambda}) \quad (\text{C.64})$$

を得る. つまり、準粒子 f の寿命として

$$\frac{1}{\Gamma_{\text{eff}}} = \frac{1}{\Lambda} \exp \left(\frac{\pi U}{4N_c \Gamma} \right) \quad (\text{C.65})$$

を得る. これらは厳密な結果と一致する.

d 電子のスペクトル関数は、スレーブ・ローターの Green 関数が Z であることにより

$$\rho_d(\omega) = Z \frac{\Gamma_{\text{eff}}/\pi}{\omega^2 + \Gamma_{\text{eff}}^2} + \rho_d^{\text{inc}}(\omega) \quad (\text{C.66})$$

となり、第 1 項が近藤共鳴の項を表す。ここで、準粒子重みとして

$$Z \equiv \langle \cos \theta \rangle_\theta^2 \quad (\text{C.67})$$

$$= \left(\frac{V_{\text{eff}}}{V} \right)^2 \quad (\because \text{自己無撞着方程式 (C.5)}) \quad (\text{C.68})$$

$$= \frac{\Gamma_{\text{eff}}}{\Gamma} \quad (\text{C.69})$$

を得るので、Friedel 和則

$$\rho_d(\omega = 0) = Z \frac{\Gamma_{\text{eff}}/\pi}{\Gamma_{\text{eff}}^2} \quad (\text{C.70})$$

$$= \frac{1}{\pi\Gamma} \quad (\text{C.71})$$

が満たされている。

付 録 D シグマモデルによるスレーブ・ローター理論の定式化

スレーブ・ローターの方法の動的平均場理論に対する利点は、後者は時間的相関しか扱わないのに対し [23]、前者は空間的相関を取り込めることである。本章では、スレーブ・ローター理論のシグマモデルによる定式化を行い、金属-絶縁体転移を調べる。本章も Ref.[25] の計算をフォローした付録である。

D.1 シグマモデルによる定式化

スレーブ・ローターを導入した Hubbard モデルの作用

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_\sigma \sum_i f_{i\sigma}^\dagger (\partial_\tau + \epsilon_0 - h_i) f_{i\sigma} + \sum_i \frac{(\partial_\tau \theta_i + i h_i)^2}{2U} - \sum_{ij\sigma} t_{ij} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} e^{i(\theta_i - \theta_j)} \right] \quad (D.1)$$

において、スレーブ・ローターの複素ボソン場への置き換え

$$\exp(i\theta_i) \Rightarrow X_i(\tau), \quad \langle |X_i|^2 \rangle = 1 \quad (D.2)$$

を行う。但し、 $X_i(\tau)$ の拘束条件は平均下において成り立つとしている。

λ を、その拘束条件

$$\langle |X|^2 \rangle - 1 = 0 \quad (D.3)$$

についてのラグランジュ未定乗数とする。 Q_f, Q_X を、自己無撞着パラメータ

$$Q_f \equiv \langle X_i X_j^* \rangle \quad (D.4)$$

$$= \langle \exp i(\theta_i - \theta_j) \rangle \quad (D.5)$$

$$= \langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle \quad (: \text{仮定}) \quad (D.6)$$

及び

$$Q_X \equiv \left\langle \sum_\sigma f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} \right\rangle \quad (D.7)$$

とする。以下、系はハーフフィリングであり、かつ電子-正孔対称性を持つと仮定する。

作用から、このモデルの Green 関数は

$$G_f(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1} = i\omega_n - \epsilon_0 + h - Q_f \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad \epsilon_0 = h = 0 \quad (D.8)$$

$$= i\omega_n - Q_f \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad (D.9)$$

$$G_X(\mathbf{k}, i\nu_n)^{-1} = \frac{\nu_n^2}{U} + \lambda + Q_X \epsilon_{\mathbf{k}} \quad (D.10)$$

である。ここで、

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbf{Z}, \quad (\text{D.11})$$

$$\nu_n = \frac{2n\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbf{Z} \quad (\text{D.12})$$

はそれぞれ、準粒子 f 及び、ボソン X の松原周波数である。

以下、エネルギーバンドとして、最隣接ホッピング

$$t_{ij} = t \quad (\text{D.13})$$

による d 次元の超立方格子上的強束縛バンド

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha} \quad (\text{D.14})$$

を考える。バンド幅の半分を $D = 2dt$ と記す。

また、簡単のため、電子のカラー量子状態の添え字が取りうる値の数は

$$N_c = 2 \quad (\text{D.15})$$

とする。つまり、スピン $1/2$ のフェルミオンである電子が 1 軌道あるときとする。

自己無撞着方程式は、未定乗数 λ について、拘束条件 (D.3) により

$$1 = \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \{G_X(\tau=0)\}, \quad \tau: \text{虚時間} \quad (\text{D.16})$$

$$= \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} G_X(i\nu_n) e^{-i\nu_n \tau} \right\}_{\tau=0} \quad (\because G_X(\tau): \text{周期 } 2\beta) \quad (\text{D.17})$$

$$= \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\nu_n^2/U + \lambda + Q_X \epsilon} \quad (\because (D.10)) \quad (\text{D.18})$$

となり、 Q_f について、定義 (D.4) により

$$DQ_f = - \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \epsilon G_X(\tau=0) \quad (\text{D.19})$$

$$= - \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \epsilon \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\nu_n^2/U + \lambda + Q_X \epsilon} \quad (\because (D.10)) \quad (\text{D.20})$$

及び、 Q_X について、定義 (D.7) により

$$DQ_X = -2 \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \epsilon n_F(Q_f \epsilon) \quad (\text{D.21})$$

となる。

D.2 金属-絶縁体転移

D.2.1 絶縁体相

絶対零度のときを考える．このとき、 Q_X についての自己無撞着方程式 (D.21) は

$$DQ_X|_{T=0} = -2 \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \epsilon n_F(Q_f \epsilon)|_{T=0} \quad (\text{D.22})$$

$$= -2 \int_{-D}^0 d\epsilon D(\epsilon) \epsilon \quad (\because n_F(Q_f \epsilon)|_{T=0} = \theta_H(-Q_f \epsilon)) \quad (\text{D.23})$$

$$\stackrel{\bar{\epsilon}}{\equiv} 2|\bar{\epsilon}| \quad (\text{D.24})$$

となる．

エネルギーバンド (D.14) は、波数のコサインであるので、

$$\min_{\mathbf{k}} \{\lambda - Q_X \epsilon_{\mathbf{k}}\} = \lambda - DQ_X \quad (\because (D.14)) \quad (\text{D.25})$$

$$= \lambda - 2|\bar{\epsilon}| \quad (\because (D.24)) \quad (\text{D.26})$$

$$> 0 \quad (\text{D.27})$$

のとき、 X のスペクトルにギャップがある．この場合、ローターに長距離秩序がなく、絶縁体相に対応している．

絶縁体相のバンドギャップ Δ_g として、

$$\frac{(\Delta_g/2)^2}{U} = \lambda - Q_X D \quad (\text{D.28})$$

を解いて

$$\Delta_g = 2\sqrt{U(\lambda - Q_X D)} \quad (\text{D.29})$$

を得る．

ここで、松原周波数についての和の計算において、次の公式

$$\text{ボソン: } \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n)^2 + m^2} = \frac{\pi \coth[\frac{|m|\pi}{2}]}{2|m|}, \quad (\text{D.30})$$

$$\text{フェルミオン: } \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2 + m^2} = \frac{\pi \tanh[\frac{|m|\pi}{2}]}{2|m|} \quad (\text{D.31})$$

を用いる．絶対零度において

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\nu_n^2/U + \lambda + Q_X \epsilon} = \frac{\sqrt{U}}{2\sqrt{\lambda + \epsilon Q_X}}, \quad \nu_n = \frac{2n\pi}{\beta} \quad (\text{D.32})$$

であるので、 Δ_g についての自己無撞着方程式 (D.18) は

$$1 = \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\sqrt{U}}{2\sqrt{\lambda + \epsilon Q_X}} \quad (\text{D.33})$$

$$= \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{U}{\sqrt{4U(\lambda - Q_X D) + 4UDQ_X(1 + \epsilon/D)}} \quad (\text{D.34})$$

$$= \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{U}{\sqrt{\Delta_g^2 + 8U|\bar{\epsilon}|(1 + \epsilon/D)}} \quad (\because (D.24), (D.29)) \quad (\text{D.35})$$

となる。同じ計算をして、 Q_f についての自己無撞着方程式 (D.20) は

$$Q_f = - \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\epsilon}{D} \frac{U}{\sqrt{\Delta_g^2 + 8U|\bar{\epsilon}|(1 + \epsilon/D)}} \quad (\text{D.36})$$

となる。これらの方程式は $\Delta_g > 0$ の絶縁体相において成り立つ。

Mott-Hubbard 転移点、つまり、 $\Delta_g = 0$ となるとき ($U = U_c$ とする) に、(D.35) は

$$1 = \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{U_c}{\sqrt{\Delta_g^2 + 8U_c|\bar{\epsilon}|(1 + \epsilon/D)}}, \quad \Delta_g = 0 \quad (\text{D.37})$$

$$= \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\sqrt{U_c}}{\sqrt{8|\bar{\epsilon}|(1 + \epsilon/D)}} \quad (\text{D.38})$$

つまり、

$$\sqrt{\frac{U_c^\infty}{U_c}} = \sqrt{\frac{8|\bar{\epsilon}|}{U_c}} \quad (\text{D.39})$$

$$= \int_{-D}^D d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\sqrt{1 + \epsilon/D}} \quad (\text{D.40})$$

となる。

$$U_c^\infty \equiv 8|\bar{\epsilon}| \quad (\text{D.41})$$

は、 $d = \infty$ での U_c の値である。

この式から、(D.35) を差し引いて

$$\sqrt{\frac{U_c^\infty}{U_c}} - \sqrt{\frac{U_c^\infty}{U}} = \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \epsilon/D}} - \frac{1}{\sqrt{\Delta_g^2/(UU_c^\infty) + 1 + \epsilon/D}} \right] \quad (\text{D.42})$$

を得る。

ここで、 Δ_g を小さい正の数とし、

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_g^2/X + Y}} = \frac{1}{\sqrt{Y}} - \frac{\Delta_g^2}{2XY^{3/2}} + \mathcal{O}(\Delta_g^3) \quad (\text{D.43})$$

であるので、 $\mathcal{O}(\Delta_g^3)$ を無視すれば

$$\sqrt{\frac{U_c^\infty}{U_c}} - \sqrt{\frac{U_c^\infty}{U}} = \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \epsilon/D}} - \frac{1}{\sqrt{1 + \epsilon/D}} + \frac{\Delta_g^2}{2UU_c^\infty \sqrt{(1 + \epsilon/D)^3}} \right] \quad (\text{D.44})$$

$$= \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\Delta_g^2}{2UU_c^\infty \sqrt{(1 + \epsilon/D)^3}} \quad (\text{D.45})$$

$$= \frac{\Delta_g^2}{UU_c^\infty} \left[\int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{1}{2\sqrt{(1 + \epsilon/D)^3}} \right] \quad (\text{D.46})$$

を得る。

ここで、

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_\alpha \quad (\text{D.47})$$

$$= -D + t \sum_{\alpha=1}^d k_\alpha^2 \quad (|\mathbf{k}| \ll 1) \quad (\text{D.48})$$

$$= -D + t|\mathbf{k}|^2 \quad (\text{D.49})$$

により、(D.46) の積分の収束が危ぶまれるバンドの底で、状態密度が自由粒子のそれと同じ形

$$D(\epsilon) \sim (D + \epsilon)^{d/2-1} \quad (\text{D.50})$$

となり、保守的に、この展開を被積分関数に代入した積分

$$\int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{1}{\sqrt{(1 + \epsilon/D)^3}} \sim \frac{2^{\frac{d-1}{2}} D^{d/2}}{d-3} \quad (\text{D.51})$$

が収束することが確認できる.

以上の計算より、 $d > 3$ に対し

$$\frac{\Delta_g^2}{U U_c^\infty} \propto \sqrt{\frac{U_c^\infty}{U_c}} - \sqrt{\frac{U_c^\infty}{U}} \quad (\text{D.52})$$

を得る. ここで、Mott-Hubbard 転移点 $\Delta_g = 0$, $U = U_c$ 付近で

$$U = U_c(1 + \delta), \quad \delta \ll 1 \quad (\text{D.53})$$

と置けば、結果 (D.52) により

$$\frac{\Delta_g^2}{1 + \delta} \propto 1 - \sqrt{\frac{U_c}{U}} \quad (\text{D.54})$$

$$= 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \delta}} \quad (\text{D.55})$$

つまり、

$$\Delta_g^2 \propto (1 + \delta) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \delta}} \right) \quad (\text{D.56})$$

$$= (1 + \delta) - \left(1 - \frac{1}{2} \delta \right) \quad (\because \delta \ll 1) \quad (\text{D.57})$$

$$\propto \delta \quad (\text{D.58})$$

$$= \left(\frac{U}{U_c} - 1 \right) \quad (\text{D.59})$$

を得る. つまり、 $d > 3$ に対し

$$\frac{\Delta_g}{U_c} \propto \left(\frac{U}{U_c} - 1 \right)^{1/2} \quad (\text{D.60})$$

を得る.

Ref.[25] の結果に拠れば、更に、 $d < 3$ に対し

$$\frac{\Delta_g}{U_c} \propto \left(\frac{U}{U_c} - 1 \right)^{1/(d-1)} \quad (\text{D.61})$$

である.

これらの、転移点 U_c 付近でのバンドギャップ Δ_g の臨界挙動を表す 2 式が、D.2.1 における結論である.

D.2.2 金属相: $U < U_c$

バンドギャップが閉じた金属相 ($U < U_c$) においては、 $\langle |X|^2 \rangle = 1$ は X 場が **Bose 凝縮している相**を表す. このとき、ローターに長距離秩序が存在し、そのため拘束条件 (D.18) は、波長が無限大の $\mathbf{k} = 0$ のモードを

Brillouin ゾーンにおいて切り離して書き直せなければならない．この相において、 λ は、バンドギャップがゼロであるので

$$\lambda - DQ_X = 0 \quad (\text{D.62})$$

であり、(D.24) により

$$\lambda = Q_X D \quad (\text{D.63})$$

$$= 2|\bar{\epsilon}| \quad (\because (\text{D.24})) \quad (\text{D.64})$$

である．絶対零度において、 X 場の Green 関数は、(D.64) を用いて

$$G_X(\mathbf{k}, i\nu) = Z\delta(\nu)\delta(\mathbf{k}) + \frac{1}{\nu^2/U + 2|\bar{\epsilon}|(1 + \epsilon_{\mathbf{k}}/D)} \quad (\text{D.65})$$

である．

凝縮の振幅

$$Z = \langle |X|^2 \rangle, \quad \nu = \mathbf{k} = 0 \quad (\text{D.66})$$

は、拘束条件

$$\langle |X|^2 \rangle = \int d\mathbf{k} G_X(\mathbf{k}, \tau = 0) \quad (\text{D.67})$$

$$= \int d\mathbf{k} \int d\nu G_X(\mathbf{k}, i\nu) \quad (\because \tau \text{ について Fourier 変換後に, } \tau = 0) \quad (\text{D.68})$$

$$= 1 \quad (\because \text{拘束条件}) \quad (\text{D.69})$$

により、決定される．ここで、積分公式

$$\int_0^\infty \frac{d\nu}{\nu^2/U + X} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{U}{X}}, \quad X = 2|\bar{\epsilon}|(1 + \epsilon_{\mathbf{k}}/D) \quad (\text{D.70})$$

を用いれば、(D.68) に (D.65) を代入して、(D.69) により

$$1 = Z + \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \sqrt{\frac{U}{8\bar{\epsilon}(1 + \epsilon/D)}} \quad (\text{D.71})$$

を得る．これは、右辺第 2 項に (D.40) を用いて

$$Z = 1 - \sqrt{\frac{U}{U_c}} \quad (\text{D.72})$$

となる．この結果から、この有限空間次元での Mott 転移のモデルでは、Mott-Hubbard 転移点 ($\Delta_g = 0$) と Brinkman-Rice 転移点 ($Z = 0$) とが U_c と一致していることが分かる．

次に、絶対零度において、(D.20) は

$$Q_f = -\frac{1}{D} \int d\epsilon \int d\mathbf{k} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \epsilon \delta(\mathbf{k}) Z - \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\epsilon}{D} \sqrt{\frac{U}{8\bar{\epsilon}(1 + \epsilon/D)}} \quad (\text{D.73})$$

$$= -\frac{1}{D} \int d\epsilon \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}=0}) \epsilon Z - \sqrt{\frac{U}{U_c^\infty}} \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\epsilon/D}{\sqrt{1 + \epsilon/D}} \quad (\because U_c^\infty = 8|\bar{\epsilon}|) \quad (\text{D.74})$$

$$= -\frac{1}{D} \epsilon_{\mathbf{k}=0} Z - \sqrt{\frac{U}{U_c^\infty}} \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\epsilon/D}{\sqrt{1 + \epsilon/D}} \quad (\text{D.75})$$

$$= Z - \sqrt{\frac{U}{U_c^\infty}} \int_{-D}^D d\epsilon D(\epsilon) \frac{\epsilon/D}{\sqrt{1 + \epsilon/D}} \quad (\because \epsilon_{\mathbf{k}=0} = -D) \quad (\text{D.76})$$

となる. このことにより, $Q_f \geq Z$ を得る. ここで,

$$Q_f = \frac{m}{m^*} \quad (\text{D.77})$$

であるため, 一般の空間次元 d において, 転移点 $U = U_c$ において $Z \rightarrow 0$ に対し, 有効質量 m^* は有限である. しかし, $d \rightarrow \infty$ の空間次元の極限においては, $D \propto \sqrt{d} \rightarrow \infty$ となるため

$$\frac{m}{m^*} = Z \quad (d \rightarrow \infty) \quad (\text{D.78})$$

を得るので, 転移点 $U = U_c^\infty$ において有効質量は発散する.

D.2.3 位相変数の集団モード

電子の Green 関数 $G_{ij}^d(\tau) \equiv -\langle T d_{i\sigma}(\tau) d_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle$ は, f と X 場とを分離させるスレーブ・ローター法の近似の下で

$$G_{ij}^d(\tau) = G_{ij}^f(\tau) G_{ij}^X(\tau) \quad (\text{D.79})$$

により与えられる. このとき, X 場の Green 関数 G_X として (D.65) を用いることにより

$$G_d(\mathbf{k}, i\omega) = (G_f \star G_X)(\mathbf{k}, i\omega) \quad (\text{D.80})$$

$$\stackrel{G_f \star G_X}{\equiv} \int d\mathbf{k}' \int d\omega' G_f(\mathbf{k}', i\omega') G_X(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i(\omega - \omega')) \quad (\text{D.81})$$

$$= Z G_f(\mathbf{k}, i\omega) + G_d^{\text{inc}}(\mathbf{k}, i\omega) \quad (\text{D.82})$$

$$= \frac{Z}{i\omega - Q_f \epsilon_{\mathbf{k}}} + G_d^{\text{inc}}(\mathbf{k}, i\omega) \quad (\text{D.83})$$

を得る. 第 1 項は, 対応するスペクトル関数の波数依存性がピークを持ち局在した項に, 第 2 項は, 波数依存性が局在していない項に対応している.[25] この表式は, D.2.2 で説明した金属相において成り立つ.

ここで, 第 2 項は, X の Green 関数において, 波数依存性が局在していない部分に帰着し, その部分は

$$G_X^{\text{inc}} = \frac{1}{\nu^2/U + 2|\bar{\epsilon}|(1 + \epsilon_{\mathbf{k}}/D)} \quad (\text{D.84})$$

である. この項は, ボソニックな集団モードを含んでおり, その分散関係は

$$\omega_X(\mathbf{k})^2 = 2U|\bar{\epsilon}| \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{D} \right) \quad (\text{D.85})$$

$$= \frac{U U_c^\infty}{4} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{D} \right) \quad (\text{D.86})$$

である. ここで,

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_\alpha \quad (\text{D.87})$$

$$= -2t \sum_{\alpha=1}^d \left(1 - \frac{k_\alpha^2}{2} \right) \quad (\mathbf{k} \rightarrow 0) \quad (\text{D.88})$$

$$= -D + \frac{D}{d} \sum_{\alpha=1}^D \frac{k_\alpha^2}{2} \quad (\text{D.89})$$

により、長波長励起 ($\mathbf{k} \rightarrow 0$) において、この分散関係は

$$\omega_X(\mathbf{k})^2 = \frac{UU_c^\infty}{4} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{D} \right) \quad (\text{D.90})$$

$$= \frac{UU_c^\infty}{4} \frac{1}{d} \sum_{\alpha=1}^D \frac{k_\alpha^2}{2} \quad (\mathbf{k} \rightarrow 0) \quad (\text{D.91})$$

$$= \frac{UU_c^\infty}{8d} |\mathbf{k}|^2 \quad (\text{D.92})$$

となる．ここで求めたギャップレスの集団モードは、Brinkman-Rice 転移において伝導バンド幅がゼロになった時点での、上部及び下部 Hubbard バンドを連続的に接続しているエネルギー領域の起源となる．

上部及び下部 Hubbard バンドは 2 種類の部分からの寄与からなる．1 つは、波数 $|\mathbf{k}|$ が小さくない領域におけるボソンモードであり、これが主要部分である．このとき、2 つの Hubbard バンドの隔たりのエネルギースケールは、分散関係 $\omega_X(\mathbf{k})$ が持つ 2 つの分枝の中心位置 $\pm \sqrt{UU_c^\infty}/2$ の間の隔たり

$$\Delta = \sqrt{UU_c^\infty} \quad (\text{D.93})$$

により与えられる．もう 1 つは、今説明した両 Hubbard バンドの尾の部分であり、 $|\mathbf{k}| \approx 0$ でのギャップレスの集団モードである．

謝辞

この論文を終えるにあたり、博士後期課程在籍間にお世話になった方々に対して謝辞を書かせて頂きます。

指導教員の森成 隆夫教授からは、私がそれまでに知らなかったスピンの物理の考え方をご教授頂きました。当研究室での重要問題として未解決に残っていた当該物質の金属-絶縁体転移のテーマ以外に、伝導電子スピンと局在化スピンとの間の s - d 相互作用の考え方をご教授頂きました。また、研究室のセミナーでは、BCS 機構での超伝導の基礎とトポロジカル相の基礎について、勉強させて頂きました。本論文以外にも、2 次元の量子計算機のモデルの考案についての研究のご指導も頂きました。

佐野 光貞助教からは 2 年半の間に、揺らぎの定理に関する非平衡 (量子) 統計力学と量子測定理論における基本的な文献のご説明を聴いてくださりまして、ご指導を頂きました。幾つかの重要な文献のご指摘も頂きました。この間に作った、文献の式をフォローした 200 ページ超の私のノートは、何時か公表したいと考えております。非平衡統計力学に関する私のご質問に対しましても、非常に含蓄のあるご回答を多々頂きました。

研究室のセミナーで共に勉強した、大阪歯科大学の佐藤 衆一助教からは、スピンについての私のご質問に対して、鋭く深いご回答を頂きました。また、共同研究を通して、当該物質についての私のご質問にお答え頂きまして、理解が深まりました。

同研究科の吉田 鉄平教授からは、FeSe の BCS-BEC クロスオーバーについての文献の紹介をセミナーでさせて頂く機会を頂きまして、ご指導を頂きました。

同研究科の木下 俊哉准教授からは、私の量子測定のセミナーをご清聴頂きまして、ご指導を頂きました。

東邦大学理学部の田嶋 尚也教授からは、本論文執筆中に貴重なアドバイスを頂きました。

公聴会では、森成 隆夫教授、吉田 鉄平教授、藤原 直樹准教授から、ご指導を頂きました。

上記に述べさせて頂いたお世話になった先生方に心から感謝を申し上げます。

最後に、私の研究を理解してくれた両親に心から感謝を申し上げます。

参考文献

- [1] 鹿兒島 誠一: 低次元導体 -有機導体の多彩な物理と密度波- (裳華房, 2000).
- [2] 鹿野田 一司, 宇治進也, 分子性物質の物理 -物性物理の新潮流- (朝倉書店, 2015).
- [3] 小林 速男, 小林昭子, 徳本圓, 日本物理学会誌 **56**, 162 (2001).
- [4] H. Kobayashi, A. Kobayashi and H. Tajima, Chemistry-An Asian Journal **6**, 1688 (2011).
- [5] L. Brossard *et al.*, Euro. Phys. J. B **1**, 439 (1998).
- [6] C. Hotta and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. J. **69**, 2577 (2000).
- [7] H. Aizawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 093701 (2018).
- [8] A. Kobayashi *et al.*, Chem. Lett. **22**, 2179 (1993).
- [9] H. Cui, H. Kobayashi and A. Kobayashi, J. Mater. Chem. **17**, 45 (2007).
- [10] S. Uji *et al.*, Nature **410**, 908 (2001).
- [11] L. Balicas *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 067002 (2001).
- [12] O. Cépas, R. H. McKenzie and J. Merino, Phys. Rev. B **65**, 100502 (2002).
- [13] H. Akiba *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 8 (2009).
- [14] T. Mori and M. Katsuhara, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 826 (2002).
- [15] M. Terao and Y. Ohashi, Physica C **412-414**, 324 (2004).
- [16] T. Kobayashi and A. Kawamoto, Phys. Rev. B **96**, 125115 (2017).
- [17] N. F. Mott and Z. Zinamon, Rep. Prog. Phys. **33**, 881 (1970).
- [18] M. Imada, A. Fujimori and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
- [19] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) A **276**, 238 (1963); A **277**, 237 (1964); A **281**, 401 (1964).
- [20] 山田 耕作: 岩波講座 「現代の物理学」 第16巻 「電子相関」 (岩波書店, 1993).
- [21] W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 4302 (1970).

- [22] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963); Phys. Rev. **134**, A923 (1964); **137**, A1726 (1965).
- [23] A. Georges *et al.*, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [24] H. Q. Lin and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **35**, 3359 (1987).
- [25] S. Florens and A. Georges, Phys. Rev. B **70**, 035114 (2004).
- [26] J. R. Schrieffer, X. G. Wen and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **39**, 663 (1989).
- [27] Y. Ran *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 014505 (2009).
- [28] W. H. Ko and P. A. Lee, Phys. Rev. B **83**, 134515 (2011).
- [29] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics*, 2nd edn. (Cambridge University Press, Cambridge, 2013).
- [30] H. Shimahara and Y. Kono, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 043704 (2017).
- [31] A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).