

自己エネルギー汎関数法¹

— モット転移の解析 —

大阪大学 工学部 稲葉 謙介

京都大学 理学部 古賀 昌久

大阪大学 工学部 菅 誠一郎

京都大学 理学部 川上 則雄

(2008 年 11 月 11 日受理)

自己エネルギー汎関数法 (self-energy functional approach) は、ラッティンジャー・ワードの定式化に基づく変分原理を利用して、対象とする系の自己エネルギーを変分的に決定する近似法である。ここで、試行関数の役割をする自己エネルギーは、“参照系”と呼ばれる容易に解くことのできる系で求める。すなわち、代理の系でパラメータを変化させて求めた自己エネルギーの中から、目的の系の物性を上手く再現するものを変分原理に基づいて探す。このとき、参照系は、対象とする系と同じ相互作用項を持つ必要がある。この方法の利点の一つに、参照系で求めた試行的な自己エネルギーを通して、相互作用の効果を非摂動論的に扱えることが挙げられる。また、ここで用いる変分原理は、系のグリーン関数が満たすべき因果律や保存則を保証する。これらの利点は、モット転移などの電子相関によって生じる様々な現象を調べるのに有効である。本稿では、自己エネルギー汎関数法について解説した後、モット転移に関する最近のトピックスについてこの方法を用いて行った研究を紹介する。

1 背景

本稿では、電子相関によって生じる量子相転移の中でもモット転移に注目し、関連する最近のトピックスに自己エネルギー汎関数法 [1, 2] を適用した研究を紹介する [3-5]。そこでまず、本章ではモット転移に関するこれまでの理論的研究を、特に動的平均場近似を取り上げて紹介する。動的平均場近似は、自己エネルギー汎関数法と関係が深く、自己エネルギー汎関数法を理解する上で重要な近似である。次に、本稿で取り上げたモット転移に関する最近のトピックスについて紹介し、最後に本稿の構成を述べる。

¹本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた記事である。

1.1 モット転移に対する理論的研究

電子相関によって引き起こされる金属・絶縁体相転移、すなわちモット転移は、強相関電子系において最も基本的問題であり、その研究の歴史は70年にも及ぶ [6-8]。しかしながら、モット転移近傍には、銅酸化物に見られる高温超伝導をはじめとして、未だに完全に解明されていない現象が数多く見出される。このような現象を理解するためには、モット転移自体の本質の解明が不可欠である。そのため、モット転移に関する研究は、今日に至るまで、依然として物性物理学分野における中心的課題の一つである。

モット転移を記述する最も単純化された有効模型として、ハバード模型が知られている。これは、強束縛近似で与えられる電子の運動エネルギー項と格子点上の局所的な電子相関項だけを有する単純な模型である。しかしながら、この最も単純な模型でさえ、遍歴性と局在性という互いに相容れない性質の競合が取り入れられているため、1次元系やトリビアルな極限を除いて厳密な答えはまだ得られていない。そのため、モット転移に関する長い研究の歴史の中でハバード近似 [9,10]、グッツヴィラー近似 [11,12]、ブリンクマン・ライス近似 [13] など様々な近似法を用いた議論が行われてきた。そのような近似の中でも、近年、特に突出した理論的進展をもたらした方法として、動的平均場近似 (dynamical mean-field theory) [14] が挙げられる。

動的平均場近似は、局所的な電子相関効果をダイナミクスまで含めて正確に扱う方法である。このことは、空間的な揺らぎを完全に無視する代わりに、時間的な揺らぎを厳密に取り扱うということの意味する。そのため、この方法は、空間次元 d が無限の極限 ($d \rightarrow \infty$) では厳密となる。ここで扱われる無限次元の系は、一見すると、現実の系とはかけ離れているように思える。しかしながら、 $1/d$ の展開の出発点としてとらえた場合、ここから得られる知見は多い。特に、空間揺らぎの効果が熱揺らぎの効果により抑制される高温の領域では良い近似となっていることが知られている。実際、動的平均場を用いて、 V_2O_3 で見られる有効質量の増大 [15-17] や温度-相互作用相図の振る舞い [14,18,19]、あるいは、 $SrVO_3$ や $LaTiO_3$ で得られている一粒子スペクトルなどの実験事実が説明されている [14]。

しかしながら、現実の物質では、軌道縮退によって誘起される軌道の揺らぎが、スピン・電荷の揺らぎに加えて存在することで、非自明で興味深い現象が多く見られる場合がある [8]。複数の軌道自由度を有する系は理論的取扱いが難しく、未解決の問題を今日でも多く残している。そのため、最近、動的平均場近似 [20-29] や、グッツヴィラー近似 [30-32] を用いて、軌道揺らぎを取り扱った研究が行われている。また、動的平均場近似では無視していた空間揺らぎが重要な寄与をし、現実の物質では反強磁性秩序や超伝導などの様々な秩序状態が現れることがある。そこで、最近では、動的平均場近似に、空間的な揺らぎを取り入れる拡張が盛んに行われている [33-36]。

自己エネルギー汎関数法は、局所的な軌道の揺らぎを容易に且つ、正確に扱うことができる。また、局所相関効果に加えて、空間的な揺らぎを逐次取り入れることが可能である。本稿では、自己エネルギー汎関数法を用いて、モット転移に対する軌道揺らぎ及び、空間揺らぎの影響を調べた結果を紹介する。そこで自己エネルギー汎関数法が、モット転移を解析する際に有効な手段となり得ることを述べ、今後の応用の可能性について議論する。次節では、本稿で扱うトピックス

について簡単に背景を述べる。

1.2 モット転移の最近のトピックス

軌道自由度を有する系のモット転移

強相関電子系の代表的な物質である遷移金属化合物や、希土類化合物においては、物性を担う d 及び f 電子が本質的に軌道縮退を有している。そのため、現実の物質においては、しばしば、電子の有する軌道縮退を考慮する必要が現れる。このとき、電荷とスピンに加えて軌道の自由度が競合あるいは協力することで、軌道秩序や巨大磁気抵抗、トリプレット超伝導などの多彩な現象が出現することが指摘されている [8]。また、最近、 $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ [37, 38] や、 $\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ [39–42] において、強い磁気的な揺らぎを伴う新奇な金属状態が観測されている。ここでは、複数の軌道において別々にモット転移が生じ、遍歴性を示す軌道と局在性を示す軌道が共存している可能性が指摘されている [23, 25]。このような、軌道縮退が重要な寄与を果たす系に特有の現象は、理論的には非自明な点を多く含んでおり興味深い。加えて、多くの軌道自由度を有する系は理論的取扱いが難しく、未解明な問題を多く残している。更に、最近の実験技術の発達により、軌道自由度を直接観測する手法も発達してきている [43]。そのため、強相関電子系における軌道自由度の重要性が改めて認識され、多軌道を有するハバード模型に対する理論的研究が活発に行われている [20–29, 31, 32, 44, 45]。

フラストレーションを有する系のモット転移

現実の物質においては、空間的な揺らぎに起因して磁気秩序や軌道秩序状態などへの相転移が生じる物質が多く存在する。フラストレーションは、このような秩序状態を抑制する働きをするため、古くから盛んに研究されているテーマである。最近、有機導体物質群が、フラストレーションを有する強相関系の研究舞台として注目を集めている。中でも、異方的三角格子上の単一軌道ハバード模型とみなせる有機導体群 $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2X$ の研究が活発に行われている [46, 47]。ここでは、アニオン X を置換することで異方性が変化するため、系の幾何学的フラストレーションを制御することが可能である。また、圧力の印加により、サイト間のトランスファーを変化させ、有効的に相互作用の強さを変えることが出来る。このため、モット転移やその周辺の物性を実験的に調べる事ができる。フラストレーションの強い2次元強相関系では、通常の磁気転移が抑制されるため、大きなクーロン相互作用まで金属相が安定化する。その結果、モット転移は非常に強い相関の下で生じることになり、転移点近傍ではフラストレーション効果を含んだ強相関系が現れる。このような系の物性を理解するためには、局所相関のみならず短距離の相関効果まで含めてそのダイナミクスを正確に取り扱う必要が生じる。このため、動的平均場を短距離の相関効果まで扱えるように拡張した、セル型動的平均場を用いた解析が近年活発に行われている [48, 49]。また、このような系においては、厳密対角化法 [50]、変分モンテカルロ法 [51] や経路積分繰り込み群法 [52–54] などを用いた解析も多く行われており、急速に研究が進展している。

1.3 本稿の構成

本章では、強相関電子系の最も基本的なテーマでありながら未解明な問題を多く含むモット転移について述べた。ここで述べたように、モット転移に関する研究は、現在でも多岐にわたって行われており、扱われるモデルもそれを扱う方法も多種多様なのが現状である。しかしながら、モット転移の性質を理解するためには、多様な問題に対して統一的な枠組みで議論することが重要である。

自己エネルギー汎関数法は、相互作用の効果を系統的に解析する際に有効である。更に、自己エネルギー汎関数法の枠組みを用いれば、様々な理論的方法を統一的に記述することができる。そのため、相関電子系が持つ多様性に関して統一的な取り扱いを可能とする。第2章において、自己エネルギー汎関数法の定式化を解説し、上述のような利点を持つことについて詳しく説明する。

第3章では、自己エネルギー汎関数法を用いて、軌道縮退を有する系のモット転移に関して解析した結果を述べる。この方法は、局所的な軌道の揺らぎを正確に取り扱うことができる。ここでは、特に有限温度における熱力学量の振る舞いに注目して解析を行う。

第4章では、異方的三角格子上のハバードモデルを解析した結果を述べる。このようなフラストレーションを有する強相関系においては、非局所相関がモット転移の性質に重要な影響を与えると考えられている。自己エネルギー汎関数法は、局所的近似を出発点に、短距離相関を順次取り入れた近似にそのまま拡張することができる。ここでは、最近接の短距離相関まで考慮に入れて解析した結果について述べる。

最後に第5章で、本稿を簡単にまとめる。

2 自己エネルギー汎関数法

本章では、自己エネルギー汎関数法の定式化を説明する。自己エネルギー汎関数法は、ラッティンジャー・ワードの定式化に基づく変分原理を利用して、対象とする系の自己エネルギーを変分的に決定する近似法である。この方法は、相互作用に関して非摂動的な扱いが可能であり、熱力学的に矛盾の無い解を得ることができる利点を持つ。ここで、試行関数の役割をする自己エネルギーは、対象とする系と同じ相互作用項を持つ参照系において、厳密に求められた自己エネルギーを用いる。このため、参照系の選び方に答えが依存するという欠点を持つ。しかしながら、参照系をうまく選ぶと、この方法は、強相関系で成功を収めている動的平均場近似や、クラスター摂動論の枠組みを再現する。加えて、これらの方法を拡張・改良する枠組みを提供する。

以下では、まず、ラッティンジャー・ワードの定式化について説明し、その後、自己エネルギー汎関数法の定式化を述べる。次に、参照系の取り方をいくつか紹介し、参照系の取り方により、自己エネルギー汎関数法が動的平均場近似などの理論的枠組みを再現することを述べる。

2.1 ラッティンジャー・ワードの定式化

ここではまず、ラッティンジャー・ワードの定式化 [55, 56] について説明する。次のような、一般的なハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(t) + \mathcal{H}_i(U), \quad (1)$$

により表される電子系を考える。ここで、 $\mathcal{H}_0(t)$ ($\mathcal{H}_i(U)$) は系の運動 (相互作用) を表す項であり、1 体 (2 体) の演算子で構成される。 t 、及び、 U は、それぞれ運動項及び、相互作用項を表すパラメータ行列である。温度 T の熱平衡状態にあるときの系の熱力学ポテンシャルは、

$$\Omega = -T \ln [\text{tr} \exp\{-(\mathcal{H} - \mu N)/T\}], \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 μ はケミカルポテンシャルであり、 N は数演算子である。また、ボルツマン定数を $k_B = 1$ とする。 $\mathcal{H}_0(t)$ で特徴付けられる自由電子系のグリーン関数 $G_0 = 1/(i\omega_n + \mu - t)$ を用いて ファインマンダイアグラムの規則を導入すると、熱力学ポテンシャル Ω は全ての閉じているダイアグラムの和で書き下される。ただし、 $i\omega_n$ は松原周波数である。

ここで、ラッティンジャー・ワードのポテンシャルと呼ばれる $\Phi[G]$ を導入する。 $\Phi[G]$ はグリーン関数 G の汎関数であり、全ての閉じている既約な骨格ダイアグラムの和で書かれるポテンシャルエネルギーである。また、 $\Phi[G]$ は次の条件を満たす。

$$\frac{\delta \Phi[G]}{\delta G} = \Sigma. \quad (3)$$

ここで、 Σ は自己エネルギーである。この $\Phi[G]$ を用いると熱力学ポテンシャルはグリーン関数 G の汎関数として次式で書き下すことができる。

$$\Omega[G] = \Phi[G] - \text{Tr}(G\Sigma[G]) + \text{Tr} \ln(-G). \quad (4)$$

ここで、 Tr は tr に加え松原周波数に関する和をとることを意味する。(4) 式を G で微分し、ダイソン方程式

$$G = (G_0^{-1} - \Sigma)^{-1}, \quad (5)$$

を用いると、

$$\frac{\delta \Omega[G]}{\delta G} = 0, \quad (6)$$

という停留条件を得ることができる。注意すべき点は、ダイソン方程式 (5) と (4) 式は全く独立に得られたという点である。このことは、(6) 式の停留条件を満たすグリーン関数は、ダイソン方程式を満たす厳密な (物理的な) グリーン関数である事を意味している。(6) 式は量子力学における変分原理の一種であり、波動関数の変化に対してエネルギーが停留値をとるとき、良い波動関数が得られるという性質に対応している。ここで、 $\Phi[G]$ のルジャンドル変換である $F[\Sigma] = \Phi[G] - \text{Tr}(\Sigma G)$ を用いて (4) 式を以下のように書き直す。

$$\Omega[\Sigma] = F[\Sigma] + \text{Tr} \ln(-(G_0^{-1} - \Sigma)^{-1}). \quad (7)$$

このとき、

$$\frac{\delta\Omega[\Sigma]}{\delta\Sigma} = 0, \quad (8)$$

が同様に成り立ち、自己エネルギーに対しても同様の変分原理が成り立つことがわかる。

以上で、熱力学ポテンシャル Ω がグリーン関数 G あるいは自己エネルギー Σ の汎関数として変分的な性質を持っていることが分かった。しかしながら、応用上の困難は解決していない。ラッティンジャー・ワード ポテンシャル $\Phi[G]$ を正確に求めることが困難であるためである。実際には近似的な $\Phi[G]$ の表式を求め、その汎関数微分により自己エネルギーを求める。このとき、 $\Phi[G]$ を基準に近似を行うため、汎関数微分で与えられる自己エネルギーは自動的に各種の保存則を満足する [57]。このように、(6) 式を利用することにより、各種の保存則を保持したままの近似理論を構築することができる。

本研究で用いる自己エネルギー汎関数法は、(4) 式で与えられる熱力学ポテンシャルを出発点におき、変分原理 (6) 式に基づき定式化を行う。このため、熱力学的に矛盾がなく、グリーン関数に対して保存則を満足する形で定式化される。自己エネルギー汎関数法が従来の方法と違う点は、 $\Phi[G]$ を陽に求めず、相互作用に関して非摂動的な取り扱いをする事である。このことに関しては次節で述べる。

2.2 自己エネルギー汎関数法の定式化

前章で述べたように、 $\Phi[G]$ の厳密な表式を求めることは非常に困難である。しかし、自己エネルギー汎関数法 [1, 2, 58] においては、この困難を次のようにして解決する。

ここでは、ラッティンジャー・ワード ポテンシャル $\Phi[G]$ の次のような性質を利用する。 $\Phi[G]$ を構成するダイアグラムは、閉じている既約な骨格ダイアグラムである。つまり、 $\Phi[G]$ を構成するダイアグラムは G 線と相互作用線のみである。このことから、 $\Phi[G]$ の汎関数としての表式は相互作用 U が変わらない限り変化しないことが分かる。また、 $\Phi[G]$ のルジャンドル変換である $F[\Sigma]$ も同様の普遍性を持つ。ここで、1 式のハミルトニアンにおいて、一体項だけを置換して ($t \rightarrow t'$) 得られるハミルトニアン

$$\mathcal{H}_{\text{ref}} = \mathcal{H}_0(t') + \mathcal{H}_i(U) \quad (9)$$

で与えられる系を考える。以下では、この元の系と相互作用項だけが全く等しい系を参照系と呼ぶ。次に、この参照系の熱力学ポテンシャル $\Omega_{t'}$ 及び、自己エネルギー $\Sigma_{t'}$ が厳密に得られると仮定する。対象の系 $\mathcal{H}$ と参照系 $\mathcal{H}_{\text{ref}}$ の熱力学ポテンシャルは自己エネルギーの汎関数として、それぞれ

$$\begin{aligned} \Omega_t[\Sigma] &= F[\Sigma] + \text{Tr} \ln(-(G_0(t))^{-1} - \Sigma)^{-1}), \\ \Omega_{t'}[\Sigma] &= F[\Sigma] + \text{Tr} \ln(-(G_0(t'))^{-1} - \Sigma)^{-1} \end{aligned} \quad (10)$$

と与えられる。ここで、先に述べた $F[\Sigma]$ の普遍性を利用すると熱力学ポテンシャルは、

$$\begin{aligned}\Omega_t[\Sigma_{t'}] &= \Omega_{t'}[\Sigma_{t'}] \\ &+ \text{Tr} \ln(-(G_0(t))^{-1} - \Sigma_{t'})^{-1}) \\ &- \text{Tr} \ln(-(G_0(t'))^{-1} - \Sigma_{t'})^{-1})\end{aligned}\quad (11)$$

と与えられる。以上で、 $\Phi[G]$ ($F[\Sigma]$) を求める困難を避けることができた。しかしながら、その代償として参照系を厳密に解かなければならない。このようにして求めた $\Omega_t[\Sigma_{t'}]$ に対して、ラッティンジャー・ワードの変分原理 (6) 式から導かれる条件式

$$\frac{\partial \Omega_t[\Sigma_{t'}]}{\partial t'} = 0, \quad (12)$$

を満たすように t' を決める。これにより、目的とする系の物性を上手く記述する自己エネルギーを持つ参照系を変分的に決定することができる。このとき、参照系の厳密な自己エネルギーを通して相互作用の効果が非摂動的に繰り込まれる。更に、(4) 式を出発点としている自己エネルギー汎関数法の変分原理 (12) 式は、グリーン関数が満たすべき各種の保存則や因果律を保証する。また、絶対零度から有限温度まで系統的な解析が可能であり、(11) 式の熱力学ポテンシャルを微分を求めることで、熱力学量を求めることができる。

以上のような利点を持つ自己エネルギー汎関数法は、電子相関によって引き起こされる物性を系統的に議論する際に有効である。一方で、参照系の選び方に最終的な答えが依存してしまうという変分法に特有の欠点を有する。しかし、特定の参照系を選ぶと、(12) 式は、動的平均場近似の自己無撞着方程式に帰着する [1,2]。このように、うまく参照系を選ぶと、自己エネルギー汎関数法は、動的平均場近似、セル型動的平均場近似やクラスター摂動法等の近似法と同等の、あるいはこれらの方法を拡張する枠組みを提供する。そのため、異なる参照系で異なる答えが得られたなら、これらの異なる近似法（動的平均場近似、セル型動的平均場近似やクラスター摂動法等）を網羅的に実行した事に対応する。そこで各近似法の利点・欠点を整理すれば、その系の本質が浮かびあがることが期待される。このように、先に述べた変分法特有の「欠点」は、実は、強相関系を取り扱うために様々な方面で発達してきた別々の方法を統一的な枠組みで記述するというポジティブな側面を持つ。電子相関効果を取り扱う完璧な処方箋は現在ではまだ存在しない。そのため、このような統一的な枠組みを持つ自己エネルギー汎関数法による解析が有用な知見をもたらすと期待される。次節では、参照系の取り方の例をいくつか挙げて、そのとき、どのような近似に対応するのかを説明する。

2.3 参照系の取り方

不純物モデル

ここでは、ハバードタイプの格子モデルに対して、参照系に不純物モデルを用いる方法を説明する。この方法は特に動的な不純物近似 [1,2,59] と呼ばれ、他の参照系を用いる場合と区別するこ

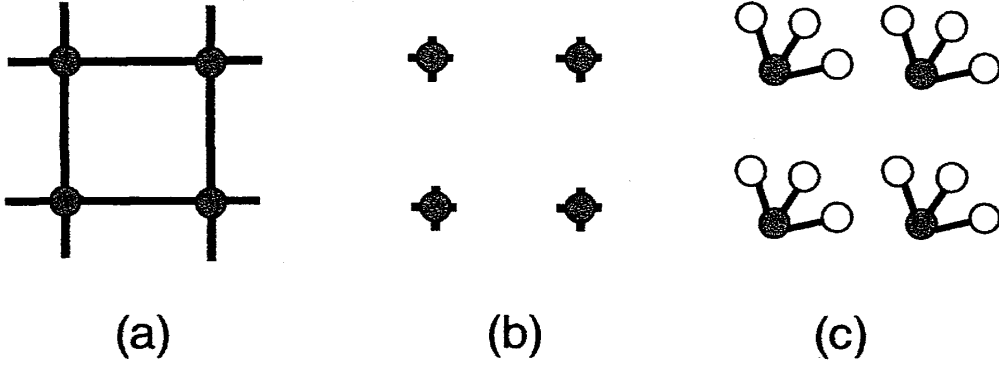


図 1: 局所近似の概念図。(a) 元々の格子模型。(b) 飛び移りをゼロにする。(c) 相互作用のない電子浴を加えた参照系。

とがある。この近似は、空間的な揺らぎを無視する代わりに、局所的な相互作用をダイナミクスを含めて厳密に扱える利点を持つ。また、空間次元が無限の極限においては空間的な揺らぎは無視しても良いため、無限次元の極限においてはこの近似は厳密な枠組みを与える。そのため、相互作用によって引き起こされる様々な物性の側面を良く捉えることができる。以下では、動的不純物近似の概要を述べ、同様の理論体系である動的平均場近似 [14] との関係について触れる。

次のような、ハバードタイプの格子モデルを考える。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_i,$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha\beta} t_{ij} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}. \quad (13)$$

ここでは、 $\mathcal{H}_i$ は局所的な相互作用しか含まないと仮定し、 $\mathcal{H}_0$ は並進対称性を持つと仮定する。前章で述べたように、参照系は対象とする系と相互作用項が等しくなくてはならない。今考えている系は局所的な相互作用しか持たないので、図 1 のように格子間の飛び移りをゼロとおいて新たに相互作用のない電子浴を付け加えることにより、参照系の条件を満足する系として不純物モデルをとることができる。ここで、電子浴のサイト数は任意であることに注意する。電子浴を少数にとどめれば、数値的厳密対角化等により自己エネルギーや熱力学ポテンシャルを得ることができるため、具体的に (11) 式を計算することができる。一方で、解を最適化する自由度が減るために真の解から遠ざかる恐れも生じる。

次に、同等の理論的枠組みである動的平均場近似との関係について考察する。動的平均場近似における枠組みでは、格子モデルを有効不純物モデルにマップし、両者が自己無撞着になるように有効不純物モデルを決める。このとき、有効不純物モデルを解く手法によって近似の良し悪しが変わる。現在では、数値繰り込み群法 [60]、量子モンテカルロ法 [61]、厳密対角化法 [62]、Projective Self-Consistent 法 [63] などが精度良い有効不純物問題の解法として知られている。動的不純物近似は、電子浴を無限個用意すれば動的平均場近似と同等の近似となる [1]。以下では、このことを詳しく説明する。

系に並進対称性があるときは、1つの参照系のみを取り出して考えればよい。停留条件 (12) 式

に (11) 式を代入すると、

$$\sum_i \sum_{i\omega_l} \left[\left(\frac{1}{G_0^{-1}(i\omega_l) - \Sigma(i\omega_l)} \right) - G'(i\omega_l) \right]_{ii} \left[\frac{\partial \Sigma(i\omega_l)}{\partial t'} \right]_{ii} = 0 \quad (14)$$

が得られる。ここで、 $G' = 1/(G_0(t') - \Sigma_{t'})$, $G = 1/(G_0(t) - \Sigma_t)$ である。この (14) 式が成立するための十分条件として、

$$\left(\frac{1}{G_0^{-1}(i\omega) - \Sigma(i\omega)} \right)_{ii} = G'_{ii}(i\omega) \quad (15)$$

が得られるが、この式は動的平均場近似の自己無撞着方程式そのものである。有限個の極しか持たない有限系のグリーン関数 G' では、十分条件 (15) 式を満たすことはできない。このため、電子浴を無限個用意した極限においてのみ、自己エネルギー汎関数法 (動的不純物近似) と動的平均場近似は同等の枠組みとなる。動的平均場近似では自己エネルギーがこの (15) 式に関して自己無撞着になるまで反復計算を繰り返す。しかしながら、この過程はいつでも完全に収束すると保障されているわけではない。自己エネルギー汎関数法においては、停留条件 (12) 式を用いて変分法的アプローチで解を探すため反復計算は必要ない。このため、停留点が 1 つだけでなく準安定な解が存在するときでも、直接その準安定解にアクセスすることが可能となる。このことは、1 次相転移を考えるとときにも有効である。電子浴を少数にとどめれば具体的に変分条件 (11) 式が計算できることは先に述べた。このことを、動的平均場近似の枠組みに置き換えて考えると、有効不純物モデルを最適化する際の自由度を制限することに対応する。有効不純物モデルの自由度を制限してしまうと自己無撞着方程式 (15) を満足する解は期待できない。動的平均場近似の枠組みにおいて、有効不純物モデルの解法に厳密対角化法を用いる方法は、この困難を適当な誤差関数を定義して解決している [62]。しかしながら、変分原理を用いて体系化された自己エネルギー汎関数法 (動的不純物近似) においては、より少数の自由度で同等の結果が得られることが報告されている [2, 59]。このため、複雑な相互作用を持つ系においての応用が期待される。また、広範なパラメータ領域にわたる系統的な解析が可能であり、加えて、絶対零度から有限温度まで矛盾なく解析ができるため、系の相図を決定する際などに有用である。

クラスター不純物模型

ここでは、短距離の相関効果を取り扱う方法について説明する。現実の物質においては、短距離相関はしばしば重要な寄与をする。特に最近では、銅酸化物などにおいて見られるモット絶縁相近傍に現れる異常な現象を説明する際にも重要であることが指摘されている [64]。

自己エネルギー汎関数法においては、参照系は元の系のハミルトニアンと同じ相互作用項を持っていればよい。このため、図 2(b) のように、元の格子を小さなクラスターに分解する。更に、図 2(c) のように、クラスターに相互作用の無い電子浴を取り付けることを考える。これは、先ほど述べた動的不純物近似をクラスターに拡張した近似に対応する。また、動的不純物近似は、電子浴の自由度 N_b を無限に $N_b \rightarrow \infty$ すると、動的平均場近似の自己無撞着方程式を再現することは前章で述べた。同様に、ここで電子浴の自由度を無限にすると、セル型動的平均場近似 (cellular

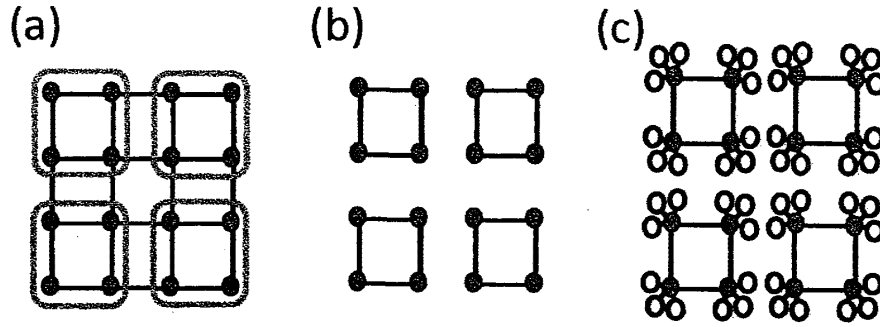


図 2: クラスター近似の概念図。(a) 元々の格子模型を小さなクラスターに分解する。(b) クラスター間の飛び移りをゼロにする。(c) 相互作用のない電子浴を加える。

dynamical mean-field theory) [34] の自己無撞着方程式を再現することができる。このように、自己エネルギー汎関数法は、局所近似から出発して、短距離相関を逐次取り入れる拡張が可能である。

この方法の更なる利点は、磁気秩序などの対称性の破れを伴う相転移を記述することができることである。例えば、変分パラメータとして、スタグガード磁場 H を導入する。1 体項で記述されるこのような場は、参照系に自由に導入することができる。ただし、変分条件 $\partial\Omega/\partial H = 0|_{H=H_{st}}$ を満たすように H を決める必要が生じる。そのとき、停留点が原点以外に現れれば ($H_{st} \neq 0$)、対称性が破れた状態が安定な状態になることを示している。すなわち、磁化した状態が安定ならば有限の H に停留点が生じる。実際、絶対零度における 2 次元正方格子上的のハバード模型においては、相互作用 U が有限のとき、有限の H に停留点が生じ、ここでは反強磁性解が安定であることが示されている。一方で、1 次元ハバード模型においては、相互作用 U が有限のとき、 $H = 0$ に停留点が生じることが指摘されている [65]。これは、強い量子揺らぎにより秩序状態が抑制されていることを示しており、一次元系で期待される性質と一致する。スタグガード磁場 H を導入し秩序状態を議論することは、人工的に系の対称性を破る操作を行っているため、一見すると、平均場近似的な取り扱いと考えられる。しかしながら、量子揺らぎの効果が参照系の自己エネルギーを通して取り入れられるため、上述のように従来の平均場近似を超えた取り扱いが可能である [65]。

クラスター模型

ここでは、引き続き短距離の相関効果を取り扱う方法について説明する。相互作用を持たない電子浴のサイト数 N_b は任意であるため、 $N_b \rightarrow 0$ の極限を取ることができる。この極限では、参照系は図 2(b) に示すような元の系をクラスター化したものである。同様の枠組みを持つ近似に、クラスター摂動展開法 (cluster perturbation theory) [66, 67] と呼ばれる方法がある。このクラスター摂動展開法は、クラスター内の相関効果だけ厳密に取り扱い、クラスターを超える長距離の相関効果は乱雑位相近似的に取り扱う近似である。すなわち、クラスター摂動展開法は、強相関極限を出発点とした摂動論的方法である。一方で、自己エネルギー汎関数法の枠組みでは、クラスター内のハミルトニアン H_c の 1 体項を変分することができる。このことから、クラスター模型を参照系に用いる方法は、変分クラスター展開 (variational cluster perturbation theory) あるいは、

変分クラスター法 (variational cluster approach) と呼ばれている [65]。この枠組みにおいても、対称性の破れを取り入れることができるため、従来型のクラスター摂動展開法では困難であった磁気秩序や超伝導などの様々な秩序状態の競合調べるのに役立つ。そのため、現在、様々な系に応用されている [58, 65, 68–73]。

その他

ここでは、上述の例以外の参照系の取り方や、自己エネルギー汎関数法のアルゴリズム自体を拡張して更に複雑な模型に適用する方法について概説する。

有機導体群 α -及び、 θ -ET 塩化合物では、多彩な電荷秩序相が見られており、長距離のクーロン相互作用が重要であると考えられている [74, 75]。そのため、この系を記述する模型としては、オンサイトのクーロン反発だけを含むハバード模型ではなく、長距離のクーロン反発を含む拡張ハバード模型が適切であると考えられる。長距離のクーロン反発を含む系に対しては、先に述べたような不純物模型や、クラスター模型を参照系にとると、“相互作用項が目的の系と等しい”という制限を満たすことができない。そこでこのような系に対しては、次のように自己エネルギー汎関数法を拡張する (さらに近似する) 方法が提案されている：(i) クラスター模型を参照系にとり、クラスター間の長距離のクーロン反発を平均場近似で取り扱う [70]。(ii) 不純物模型を参照系に取り、長距離のクーロン反発の効果をボゾン場との混成に置き換える [76]。この方法は、拡張動的平均場近似 [33] と呼ばれる方法に対応しており、近藤格子模型などにも応用が可能である。

次に、非一様なポテンシャルが存在する並進対称性のない系を考える。非一様なポテンシャルは、冷却原子気体を人工的に作成した格子に閉じ込めた光学格子系 [77, 78] や、表面や接合面での現象を説明するための模型 [79] を考える際に特に重要であり、最近注目を集めている。自己エネルギー汎関数法の定式化は、システムサイズが有限ならば、このような非一様系に関してもそのまま適用が可能である。不純物模型を参照系に取れば、実空間動的平均場近似 [80, 81] などと呼ばれる方法に対応する近似になる。

また、乱れを有する系に対しても、統計平均を適切に行うことで乱れに対して正確な取り扱いが可能である。格子欠損や不純物などの乱れのない物質は実質存在しないため、乱れの影響を解析することは重要である。特に、希薄磁性半導体 $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ 、 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sn}$ においては、乱れの影響と、電子相関の影響が競合し、非自明な物性が現れることが指摘されている [8]。不純物模型を参照系に取れば、相互作用に関して動的平均場近似を、乱れに関しては、コヒーレントポテンシャル近似を行うことになる [82, 83]。

電子と格子の相互作用は、マンガン酸化物などにおいてしばしば重要な寄与をすることが指摘されている [8]。最近では、高温超伝導体物質である銅酸化物において、アンダードープ領域で電子・格子相互作用が無視できないことが指摘されている。この効果を取り扱う有効模型として、通常のハバード模型に、フォノンと電子の混成項を含めたホルスタイン・ハバード模型が挙げられる。ボゾン場を含む不純物模型を参照系として用いて、この模型が解析されている [84, 85]。

2.4 まとめ

本章では、自己エネルギー汎関数法の定式化について述べた。この方法では、参照系を試行的に選び、参照系の一体項を変分パラメータとして得られた自己エネルギーの中から、元の系の物性を良く再現するものを決定する。このため、参照系の選び方に答えが依存するという変分法特有の欠点を持つ。しかしながら、不純物系を参照系として用いると、自己エネルギー汎関数法は、強相関系で成功を収めている動的平均場近似の枠組みを再現する。また、参照系をクラスター不純物模型にすると、セル型動的平均場近似の枠組みが再現される。加えて、ここでは、対称性の破れを取り入れる拡張も可能である。このように、自己エネルギー汎関数法は、参照系の取り方によって、強相関系で成功を収めている他の理論的枠組みを再現し、これらの方法を統一的な枠組みで記述することを可能とする。更には、これらの方法を拡張・改良することができるため、従来の方法では解析が困難であった問題へのアプローチが可能となる。

自己エネルギー汎関数法の変分原理は、系のグリーン関数が満たすべき因果律や、保存則を保証する。更に、熱揺らぎの効果を自然に取り入れることも可能であるため、絶対零度から有限温度まで系統的な解析ができる。また、参照系の自由度を小さく制限することで、軌道縮退系などの複雑な模型に適用することができる。さらに、局所相関と短距離相関の効果をダイナミクスまで含めて取り入れたうえ、対称性の破れた秩序状態を取り扱うことも可能である。これらの利点を利用して、次章からは、参照系に不純物模型及び、クラスター参照模型を用いて、最近のモット転移のトピックスについて調べた結果を紹介する。

3 軌道縮退を有する系のモット転移

本章では、自己エネルギー汎関数法を用いて、軌道自由度を有する強相関電子系において生じるモット転移の性質を解析した結果を紹介する [3]。ここでは、不純物模型を参照系に用いた。前章で述べた通り、これは、動的平均場近似と同等の局所的相関のみ正確に扱う近似に相当する。局所近似は、空間的揺らぎを無視した近似であるため、現実の物質でしばしば見られる低温における秩序状態を取り扱うことは難しい。しかしながら、空間揺らぎが熱揺らぎに抑制される高温の領域では、局所近似はよい近似になることが知られている。自己エネルギー汎関数法は、ラッティンジャー・ワードの定式化に従っているため、低温から高温の領域まで熱揺らぎを系統的に議論することができる。更に、エントロピーや比熱などの熱力学量を精度よく求めることができる。これらの利点を利用し、特に高温領域に注目して、軌道に依存するモット転移の性質を議論する。

3.1 背景

近年、軌道縮退を有する強相関系特有のモット転移である、軌道依存モット転移に注目が集まっている。典型的な物質は、 $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ [37, 38] 及び、 $\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$ [39, 41, 42] である。これらの物質では、軌道依存モット転移がそれぞれ、化学置換及び、温度を変化させることによって

生じることが指摘されている。これらの実験的な発見に刺激され、主に動的平均場近似を用いた理論的な研究が活発に行われている [3, 20–29, 31, 32, 44, 86, 87]。これらの解析によって、異なるバンド幅を持つ2軌道ハバード模型では、一般的に軌道に依存したモット転移が生じることが指摘されている。しかしながら、絶対零度における詳細な解析に比べて有限温度における解析は不足している。有限温度におけるモット転移の性質を調べる事は、現実的な物質を考慮する上で重要である。特に、遍歴性と局在性を併せ持つ軌道依存モット相が熱揺らぎに対して安定に存在するかどうかを議論する。

3.2 模型と方法

以下では、異なるバンド幅をもつ2重縮退ハバード模型を自己エネルギー汎関数法を用いて解析する。ハミルトニアンは、次のように与えられる。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_i \mathcal{H}'_i, \quad (16)$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \sigma} (t_\alpha - \mu \delta_{ij}) c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\alpha\sigma}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_i = & U \sum_\alpha n_{i\alpha\uparrow} n_{i\alpha\downarrow} + \sum_{\sigma\sigma'} (U' - \delta_{\sigma\sigma'} J) n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} \\ & - J (c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow} c_{i2\downarrow}^\dagger c_{i2\uparrow} + c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow}^\dagger c_{i2\uparrow} c_{i2\downarrow} + H.c.). \end{aligned} \quad (18)$$

ここで、 $c_{i\alpha\sigma}^\dagger (c_{i\alpha\sigma})$ は i 番目の格子点上のスピン $\sigma (= \uparrow, \downarrow)$ 、軌道 $\alpha (= 1, 2)$ を持つ電子の生成 (消滅) 演算子である。また、 $n_{i\alpha\sigma} = c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma}$ である。ここで、 t_α は、 α 軌道の飛び移り積分、 μ はケミカルポテンシャル、 $U (U')$ は軌道内 (軌道間) クーロン相互作用、 J はフント結合を表す。また、軌道の対称性を考慮して $U = U' + 2J$ の条件を課す。ここでは、無限次元ベテ格子を取り上げて解析を行う。このとき、 $U = U' = J = 0$ においては、半楕円の状態密度 $\rho_\alpha(x) = 4/\pi W_\alpha \sqrt{1 - (2x/W_\alpha)^2}$ が得られる。バンド幅の比 $R \equiv W_1/W_2 (R \leq 1)$ を導入し、広いバンド幅を持つ軌道2のバンド幅を $W_2 = 4$ と固定する。また、ハーフ・フィリングにおけるモット転移に注目するため $\mu = U/2 + U' - J/2$ とする。

ここでは、次のようなハミルトニアンで与えられる不純物模型を参照系として用いる。

$$\mathcal{H}_{\text{ref}} = \sum_i \mathcal{H}_{\text{ref}}^{(i)}, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{ref}}^{(i)} = & \sum_{\alpha\sigma} \varepsilon_{0\alpha}^{(i)} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma} + \sum_{k=1}^{N_b} \sum_{\alpha\sigma} \varepsilon_{k\alpha}^{(i)} a_{k\alpha\sigma}^{(i)\dagger} a_{k\alpha\sigma}^{(i)} \\ & + \sum_{k=1}^{N_b} \sum_{\alpha\sigma} V_{k\alpha}^{(i)} (c_{i\alpha\sigma}^\dagger a_{k\alpha\sigma}^{(i)} + H.c.) + \mathcal{H}'_i, \end{aligned} \quad (20)$$

ここで、不純物電子 $c_{i\alpha\sigma}^\dagger (c_{i\alpha\sigma})$ は、元の格子模型における i 番目の格子点上の電子に対応するため、ハミルトニアン (18) 式と同じ表記を用いる。また、 $a_{k\alpha\sigma}^{(i)\dagger} (a_{k\alpha\sigma}^{(i)})$ は i 番目の格子点の電子と混成す

る $k = (1, 2, \dots, N_b)$ 番目の電子浴の電子の生成（消滅）演算子である。電子浴の数 N_b によって結果に定性的な違いは少ないため [59]、 $N_b = 1$ の参照系を用いて解析を行う。また、ここでは、ハーフ・フィリングにおけるモット転移に注目するため $\epsilon_{0\alpha} = 0$, $\epsilon_\alpha = \mu$ 及び、 $\mu = U/2 + U' - J/2$ の条件を課す。そのため、変分パラメータとして V_α ($\alpha = 1, 2$) を考慮すればよい。自己エネルギー汎関数法における変分条件、 $\partial\Omega/\partial V_\alpha = 0$ ($\alpha = 1, 2$) を満たす V_α を求めることで、オリジナル系の性質を良く再現する変分自己エネルギーを決定する。このとき熱力学ポテンシャルは次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 \Omega/L &= \Omega_{\text{imp}} - 2 \sum_{\alpha} \sum_{\ell} F(\omega'_{\alpha\ell}) - 2 \sum_{\alpha} \sum_{k=1}^{N_b} F(\omega_{k\alpha}^b) \\
 &\quad + 2 \sum_{\alpha} \sum_{\ell} \int_{-\infty}^{\infty} dz \rho_{\alpha}(z) F[\omega_{\alpha\ell}(z)],
 \end{aligned} \tag{21}$$

$$F(x) = -T \ln[1 + \exp(-x/T)]. \tag{22}$$

ここで、 Ω_{imp} は参照系の熱力学ポテンシャルであり、 L はサイト数である。 $\omega_{\alpha\ell}(z)$ [$\omega'_{\alpha\ell}$] は、それぞれ、格子系（参照系）のグリーン関数 G_{α} (G'_{α}) の極であり、 $\omega_{k\alpha}^b = \epsilon_{k\alpha} - \mu$ である。参照系のグリーン関数は

$$G'_{\alpha}(\omega) = [\omega + \mu - \epsilon_{0\alpha} - \Delta_{\alpha}(\omega) - \Sigma_{\alpha}(\omega)]^{-1}, \tag{23}$$

$$\Delta_{\alpha}(\omega) = \sum_{k=1}^{N_b} \frac{V_{k\alpha}^2}{\omega - \omega_{k\alpha}^b}, \tag{24}$$

で与えられる。ここで、 $\Sigma_{\alpha}(\omega)$ は参照系の自己エネルギーである。一方で、格子系のグリーン関数は

$$G_{\alpha}(\omega; z) = [\omega + \mu - z - \Sigma_{\alpha}(\omega)]^{-1}, \tag{25}$$

で与えられる。グリーン関数 G_{α} 及び G'_{α} の極の導出方法については、付録 A にまとめる。

モット転移の性質を議論するために、次の物理量を解析する。金属相では、 α 軌道の繰り込み因子 Z_{α} がフェルミ液体の性質を議論する上で重要になる。繰り込み因子は電子の有効質量の逆数に比例する物理量であり、

$$Z_{\alpha}^{-1} = \left(1 - \frac{\partial \Sigma_{\alpha}(\omega)}{\partial \omega} \right)_{\omega=0}, \tag{26}$$

で与えられる。更に、次式で与えられるエントロピーを計算する。

$$S/L = -\frac{d\Omega/L}{dT} \quad (27)$$

$$= -\frac{\partial\Omega/L}{\partial T} - \frac{\partial t'}{\partial T} \frac{\partial\Omega/L}{\partial t'} \quad (28)$$

$$= S_{\text{imp}} + 2 \sum_{\alpha} \sum_m F'(\omega'_{\alpha m}) + 2 \sum_{\alpha} \sum_{k=1}^{N_b} F'(\omega_{k\alpha}^b) - 2 \sum_{\alpha} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} dz \rho_{\alpha}(z) F'[\omega_{\alpha m}(z)], \quad (29)$$

$$F'(x) = [F(x) - (x - \partial x / \partial T) f(x)] / T, \quad (30)$$

$$f(x) = 1 / (1 + \exp(x/T)). \quad (31)$$

ここで、 $S_{\text{imp}} = -\partial\Omega_{\text{imp}}/\partial T$ は参照系のエントロピーである。また、 $\partial\Omega/\partial t' = 0$ となることを利用している。レーマン展開の表式から明らかであるが、参照系のグリーン関数の極の温度微分は温度に依存しない ($\partial\omega'_{\alpha m}/\partial T = 0$)。一方で、参照系のグリーン関数 G'_{α} の零点、及び、格子系のグリーン関数 G_{α} の極 $\omega_{\alpha m}(z)$ は温度に依存することに注意が必要である。これらの導出方法は、付録 B にまとめる。次に、比熱 $C = TdS/dT = -Td^2\Omega/dT^2$ を以下の点に注意して求める。(29) 式を更に温度 T で微分すると、 $\partial^2\Omega/\partial t'^2 \neq 0$ なる項が現れる。この項を求めることは非常に困難であるため、比熱 C は、エントロピー S を数値差分して求める。このとき、差分に必要な（少なくとも）2 点を求める度に、新たに自己エネルギー汎関数法の変分問題を解く必要が生じる。

また、(21) 式中及び、(29) 式中の z 積分を実行する際に次の関係式

$$\frac{\partial\omega_{\alpha\ell}(z)}{\partial z} = \left[1 - \frac{\partial\Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial\omega} \right]_{\omega \rightarrow \omega_{\alpha\ell}(z)}^{-1}, \quad (32)$$

を利用して、計算の高速化を図る。この関係式の導出は、付録 C にまとめる。

3.3 絶対零度における軌道依存モット転移

ここでは、バンド幅の比 $R = 0.5$, $U'/U = 0.5$, $J/U = 0.25$ と固定して絶対零度における系の基底状態を調べ、軌道依存モット転移の性質を議論する。まず、図 3 に各軌道の繰り込み因子の相互作用 U 依存性を示す。相互作用の増加と共に、両軌道の電子の繰り込み因子は減少し、重い準粒子が生じていることが分かる。ここで、狭いバンド幅を持つ軌道がより強く繰り込まれていることに注意する。これは、有効的な相互作用 U/W_{α} が狭い軌道でより強くなるためである。更に、相互作用を強くしていくと、 $U \sim 2.4$ において、狭い軌道の繰り込み因子だけがゼロになる。これは、片方の軌道だけ絶縁体的な振る舞いをする、軌道依存モット相への転移が生じたことを意味している。更に相互作用を増加させると、 $U \sim 3.4$ において、広いバンド幅を有する軌道 2 も絶縁体的になることがわかる。ここでは、軌道依存モット相から、両軌道が絶縁体となった相（絶縁体相）への転移が生じている。

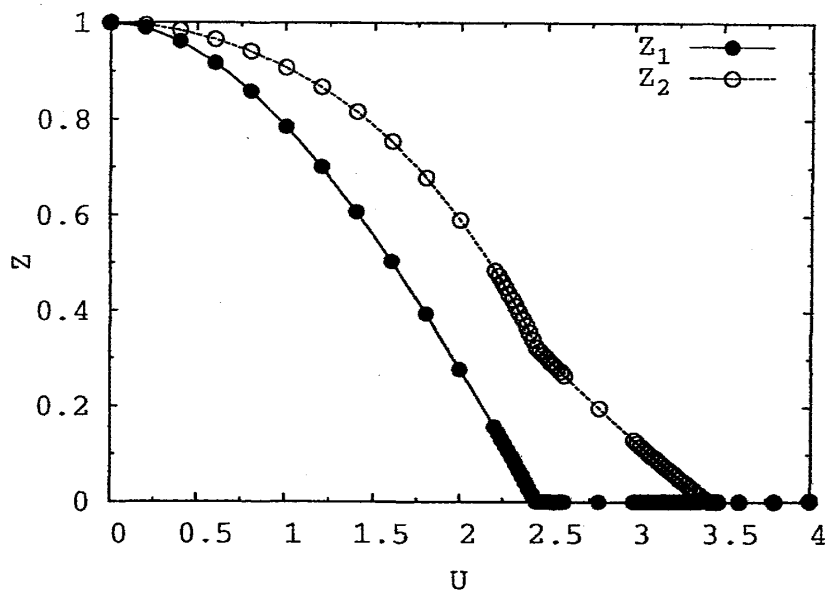


図 3: ハーフ・フィリング、バンド幅の比 $R = 0.5$ 、 $U'/U = 0.5$ 、 $J/U = 0.25$ における各軌道の繰り込み因子 Z_α の相互作用 U 依存性。

次に、エントロピー S/L を調べた結果を図 4 に示す。エントロピーには、2 段の階段状の振る舞いが見られ、先に述べた 2 つの転移が生じる際にエントロピーが変化していることが分かる。この振る舞いは、以下に述べるように軌道依存モット転移を特徴づけている。まず、相互作用が弱い領域 $0 \leq U \lesssim 2.4$ では、エントロピーはゼロである。これは、系がフェルミ液体的な金属相であることを意味している。次に、片方の軌道のみ絶縁体的な振る舞いをする軌道依存モット相 ($2.4 \lesssim U \lesssim 3.4$) ではエントロピーは $S/L = \ln 2$ の値をとる。これは、この相で $s = 1/2$ の自由スピンの出現することを意味している。最後に、絶縁相においては、フント結合の影響で基底状態がトリプレット状態となるためエントロピーは $S/L = \ln 3$ となる。ここで得られた $S/L = \ln 2$ 、 $S/L = \ln 3$ の残留エントロピーは、空間的な揺らぎを考慮していないため生じる。そのため、空間的な揺らぎを考慮すれば、ここで得られた階段状の振る舞いは変化すると考えられる。しかしながら、熱揺らぎが強い高温領域においては、空間揺らぎが抑制され同様の振る舞いが現れることが期待される。

最後に、熱力学ポテンシャルの変分パラメータ V_1 及び、 V_2 依存性を調べ、変分パラメータが物理的に重要な意味を持つことについて議論する。不純物サイト（ハバード模型のある格子点に対応する）と電子浴サイト（ある格子点と周りとの混成を有効的に記述する役割をする）との混成項 V_α は、 α 軌道の有効的なトランスファー t_α^{eff} に対応する。このことは、不純物サイトをハバード模型のある格子点とすると、電子浴サイトはその格子点と周りの格子点との混成を有効的に記述する事を考慮すれば、直感的に理解できる。図 4 の挿入図に、 $\Omega(V_1, V_2)$ の等高線図を示す。クーロン相互作用が小さいとき ($U = 2.3$) 熱力学ポテンシャルの極小を与える点は $(V_1, V_2) \sim (0.14, 0.55)$ 近傍に存在する。これは、両軌道が有限の有効トランスファーを持ち、遍歴性を示すことを意味して

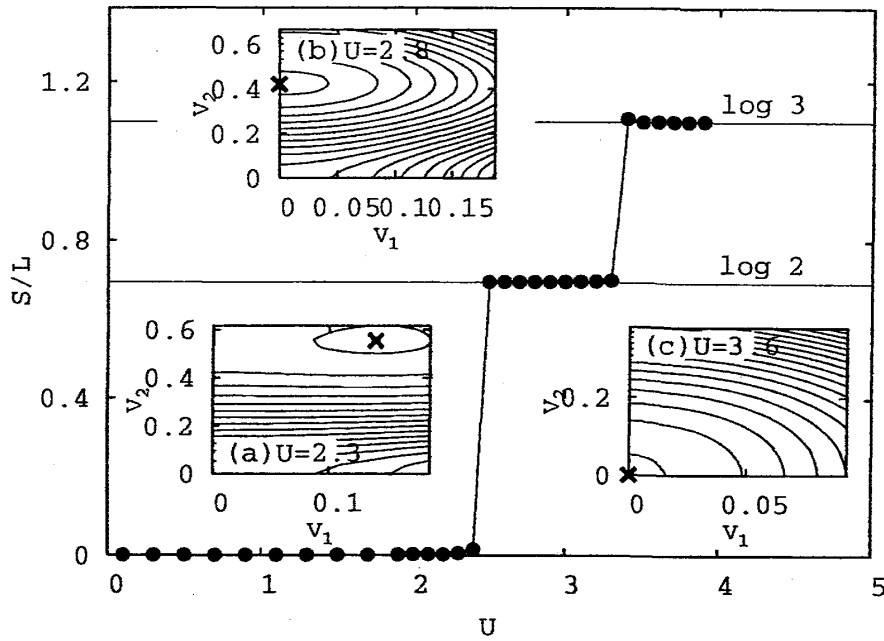


図 4: ハーフ・フィリング、 $R = 0.5$ における 1 格子点あたりのエントロピー S/L の U 依存性。ここでは、 $U'/U = 0.5$ 、 $J/U = 0.25$ 、 $T = 0$ とする。挿入図は、(a) $U = 2.3$ 、(b) 2.8 及び (c) 3.6 における熱力学ポテンシャルの V_1, V_2 依存性を示す。バツ印は、熱力学ポテンシャルの極小を意味する。

いる。また、相互作用を増加させると停留点は V_2 軸に近づく事が分かる [挿入図 (b)]。このとき、広いバンド幅を持つ軌道 2 においては有効トランスファーが有限であるが、狭いバンド幅を持つ軌道 1 においては零になっている。これは、金属的な軌道と絶縁体的な軌道が共存していることを示している。更に相互作用を増加させた $U > 3.4$ の領域においては、停留点は原点 ($V_1 = V_2 = 0$) にだけ存在する。このことは、この領域では両軌道共に絶縁体となることを意味している。絶対零度においては上記の 3 種類の極小以外には停留点は見られず、同時に 2 つの極小が生じることはない。このことは、2 次のモット転移が 2 度生じていることを示している。単一軌道ハバード模型においてもまた、絶対零度で 2 次の金属・絶縁体転移が生じる。軌道依存モット転移において現れる 2 度の相転移は、単一軌道ハバード模型における転移と同様の振る舞いをしている。

このように、自己エネルギー汎関数法においては、変分パラメータが物理的に重要な意味を持つ場合がある。ここでは、混成 V_α は有効的な電子のトランスファーと捉えることができ、有効的に、モット転移を特徴づけるオーダーパラメータの役割をしていることがわかる。このことは、モット転移の性質を調べるのに有効な手段となり得る。

3.4 有限温度における軌道依存モット転移

次に、有限温度における軌道依存モット転移について解析を行う。有限温度の軌道依存モット転移の性質を明らかにするために、金属相 $U = 2.3$ において温度 $T = 0.002$ を導入し、熱揺らぎの影響を解析する。得られた熱力学ポテンシャル $\Omega(V_1, V_2)$ を図 5 に示す。絶対零度では、一つだけ見られた金属相に対応する極小 (V_1, V_2) $\sim (0.2, 0.6)$ に加えて (図 4 左下の挿入図)、軌道依存モット

相に対応する極小 (V_1, V_2) $\sim (0.02, 0.55)$ が現れることが分かる。この2重極小構造は (図 5(b))、

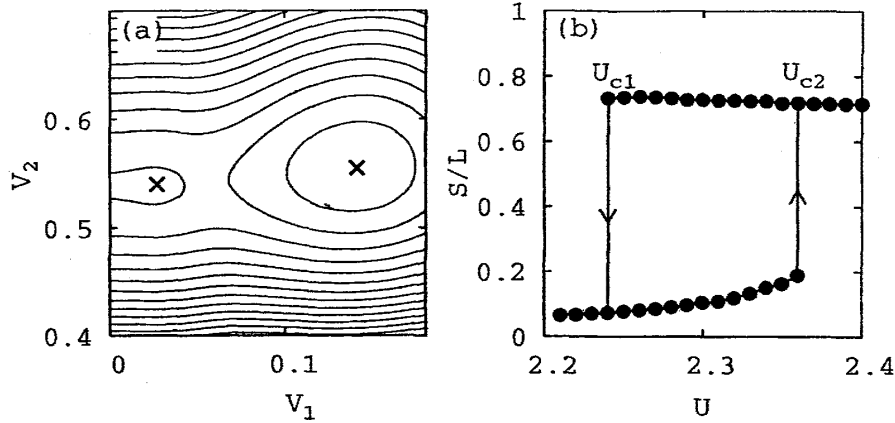


図 5: (a) ハーフ・フィリング、 $R = 0.5$ 、 $T = 0.002$ 、 $U = 2.3$ 、 $U'/U = 0.5$ 、 $J/U = 0.25$ における、熱力学ポテンシャル $\Omega(V_1, V_2)$ の等高線図。ここでは、2つの極小が共存する。左から、軌道依存モット相、金属状態に対応する停留点である。(b) ハーフ・フィリング、 $R = 0.5$ における相互作用に対するエントロピーの変化。ここでは、 $T = 0.002$ 、 $U'/U = 0.5$ 、 $J/U = 0.25$ とする。

有限温度におけるヒステリシスを伴う1次のモット転移が生じることを示している。単一軌道ハバード模型においても、有限温度では、ヒステリシスを伴う1次のモット転移が生じる。絶対零度が続いて、有限温度においても単一軌道ハバード模型におけるモット転移と同様の性質の転移が生じていることが分かる。温度 $T = 0.002$ のとき、相互作用 U を増加させると、 $U_{c2}^{(1)} \sim 2.36$ 近傍で金属状態に対応する極小は消滅する。ここでは、金属相から軌道依存モット相への転移が生じる。一方で、 U を減少させると軌道依存モット相は $U_{c1}^{(1)} \sim 2.24$ まで存在する。 $T = 0.002$ における一次転移点 $U_c^{(1)} \sim 2.33$ は2つの状態の熱力学ポテンシャルの交点により求められる。

このような解析により、得られた相図を図 6 に示す。2つの共存領域が $U \sim 2.4$ 及び $U \sim 3.3$ 周辺に存在する。ここで、 $U_{c1}^{(1)}(U_{c2}^{(1)})$ は、相互作用を増加(減少)させたときに金属相(軌道依存モット相)が不安定になる点であり、 $U_c^{(1)}$ は、金属相と軌道依存モット相の自由エネルギーが一致する転移点である。また、 $U_{c1}^{(2)}(U_{c2}^{(2)})$ は、相互作用を増加(減少)させたときに軌道依存モット相(絶縁相)が不安定になる点であり、 $U_c^{(2)}$ は、軌道依存モット相・絶縁相間の自由エネルギーが一致する転移点である。境界線 $U_{c1}^{(i)}$ 、 $U_{c2}^{(i)}$ 及び U_c は臨界温度 $T_c^{(i)}$ において一致する ($i = 1, 2$)。

軌道依存モット転移の際に現れる2度の相転移は、単一軌道ハバード模型において見られるものと同様の性質を持っていることが見て取れる。このことは、バンド幅が異なるために軌道の揺らぎが抑制され、その結果、各軌道が有効的に独立に振る舞うことに起因している [87]。また、フント結合 J/U を大きくすると、軌道揺らぎが抑制される。このため、フント結合が大きい系では、軌道依存モット相がより安定になることが知られている [27]。

次に、 $T_c^{(i)}$ ($i = 1, 2$) より高温において生じる金属、軌道依存モット相及び、絶縁相間のクロスオーバーの振る舞いを調べる。このことを明らかにするために、エントロピー及び、比熱を計算する。結果を図 7 に示す。絶対零度同様 (図 4) 階段状の構造がエントロピーに見られるが、ここでは、エントロピーには飛びは無く連続的に変化している。また、比熱には特徴的なピーク構造

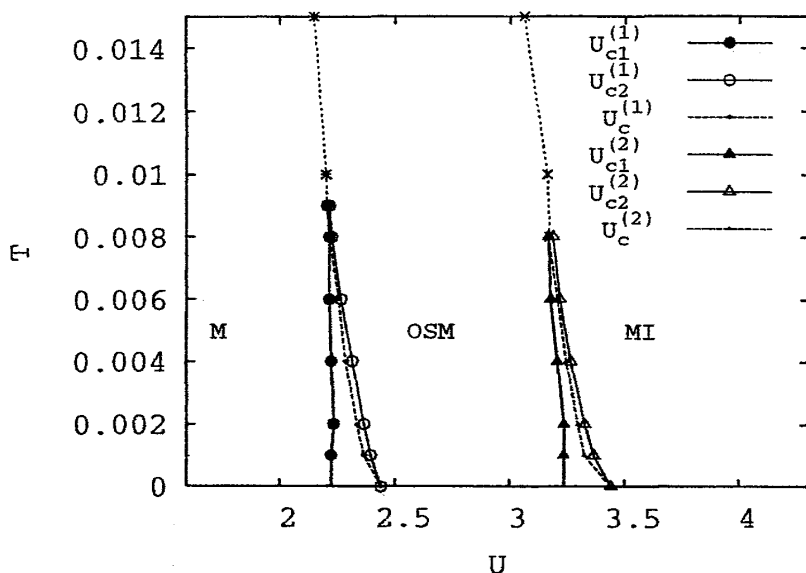


図 6: ハーフ・フィリング, $R=0.5$, $U'/U=0.5$, $J/U=0.25$ における $U-T$ 相図。ここでは 2 つの共存領域が存在する。(左) 金属・軌道依存モット相の共存相。(右) 軌道依存モット相・絶縁体の共存相。

が見られる。この比熱のピークは、 U の増加（減少）に伴い系が各相を移り変わる際に、巨視的な量のエントロピーが解放（必要と）されることに起因する。これらの熱力学量は 3 つの相をクロスオーバーで移り変わっていることを示している。このことは、有限温度においても軌道依存モット相が明確に見えることを示唆している。

3.5 まとめ

本章では、異なるバンド幅をもつ 2 重縮退ハバード模型を取り上げ、自己エネルギー汎関数法を用いて、ハーフ・フィリングにおける有限温度の軌道依存モット転移について調べた。その結果、軌道依存モット転移の有限温度での相図を決定した。ここでは、金属・軌道依存モット相及び、軌道依存モット相・絶縁相が共存する 2 種類の共存領域が現れることを明らかにした。これは、有限温度において、軌道依存モット転移は 1 次転移であること示している。また、この共存領域が消える高温の領域においても、軌道依存モット転移を特徴付ける振る舞いが比熱やエントロピーなどの熱力学量に現れる事を明らかにした。

ここではまた、自己エネルギー汎関数法の枠組みにおいて、変分パラメータが重要な物理的意味を有する場合があることについて述べた。特に、不純物模型を参照系に用いた場合は、不純物格子と電子浴上の格子間の混成項が有効トランスファーに対応し、これがモット転移を特徴づける有効的なオーダーパラメータの役割をすることを述べた。常磁性のモット転移は、対称性の破れを伴わないため、この相転移を現象論的に記述することは容易ではない。自己エネルギー汎関数法は、それを容易に実現する方法の一つであり、モット転移を扱う際に有効であると言える。次章では、この点を利用し、更に、短距離の相関効果を取り入れて、常磁性のモット転移と対称性

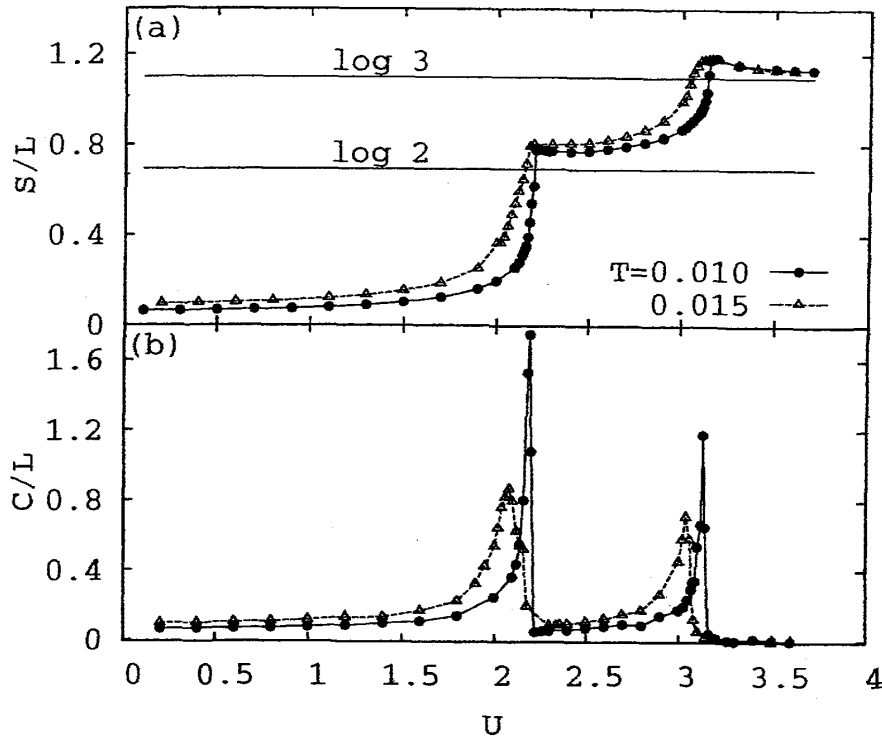


図 7: (a) ハーフ・フィリング、 $R = 0.5$ におけるエントロピー S/L 及び (b) 比熱 C/L の相互作用 U 依存性。ここでは、クロスオーバー領域 ($T > T_c(1, 2)$)、 $U'/U = 0.5$, $J/U = 0.25$ とする。

の破れを伴うモット転移の競合を調べる。

4 異方的三角格子上のハバード模型のモット転移

本章では、クラスター不純物模型を参照系に用いて、絶対零度において異方的三角格子上のハバード模型を解析した結果を紹介する [4]。この近似は、局所相関のみならず短距離の相関までダイナミクスを含めて取り入れることができる。このような精神は、セル型動的平均場近似や動的クラスター近似等でも見られる。自己エネルギー汎関数法は、更に、磁気秩序等の対称性の破れを伴う相について、平均場近似を超える取り扱いを可能とする。更に、前章で議論したように、常磁性のモット転移に対しても有効的に、オーダーパラメータを定義することができる。これらの利点を用いて、ここでは、非磁性のモット絶縁相が磁気秩序を伴う絶縁相に対して安定に存在するかどうかを調べる。

4.1 背景

幾何学的なフラストレーションを有する強相関電子系は、最近、最も注目を集めている系の一つである。例えば、パイロクロア構造を持つ LiV_2O_4 において観測された重い電子状態に関して、フラストレーションの効果が重要な役割をしていることが指摘されている [88]。また、最近、特

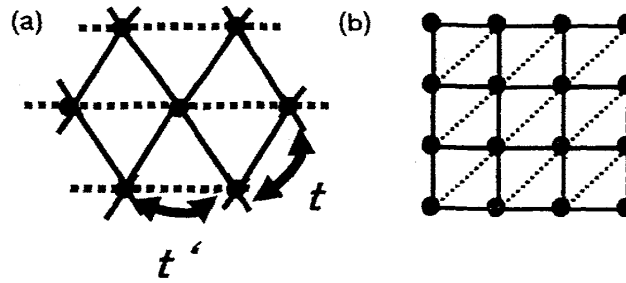


図 8: (a) 異方的三角格子構造。(b) トポロジ的に等価な格子構造。

に注目を集めている物質の一つに、三角格子構造を持つ有機導体 κ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu $_2$ (CN) $_3$ が挙げられる。ここでは、 $T \sim 32\text{mK}$ という極低温まで、非磁性の絶縁相が生じることが指摘されている [46]。このことは、新奇なスピン液体状態が絶縁相で実現していることを示唆している。このような実験事実に刺激され、最近、様々な理論的手法によって、フラストレーションを有する格子構造上のハバード模型が解析されている [48–51, 53, 54, 68]。これらの解析により、三角格子上のハバード模型において、非磁性絶縁体状態が実現することが指摘されているが [49, 50, 54, 68]、これらの研究では、 120° 構造を持つ反強磁性秩序状態 (120° -AFI) についての取り扱いが十分ではない。最近、変分モンテカルロ法を用いた解析により、 120° -AFI 状態が、非磁性絶縁体よりも安定化されることが指摘されている [51]。しかしながら、ここでは、非局所的な相関効果を適切に取り扱えてない可能性がある。このため、短距離相関まで正確に取り扱う方法による解析が望まれている。

4.2 模型と方法

以上のような背景の下、ここでは、異方的三角格子におけるハーフ・フィリングのハバード模型を取り上げ解析を行う。この系のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(t) + \mathcal{H}'(U), \quad (33)$$

$$\mathcal{H}_0(t) = \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \sum_{\sigma} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma}, \quad (34)$$

$$\mathcal{H}'(U) = \sum_{\mathbf{r}} U n_{\mathbf{r}\uparrow} n_{\mathbf{r}\downarrow}, \quad (35)$$

で与えられる。ここで、 t (U) は、1 粒子 (2 粒子) 項のパラメータ行列であり、 $c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{r}\sigma}$) は、スピン σ ($=\uparrow, \downarrow$) $\mathbf{r}$ サイトの電子の生成 (消滅) 演算子で、 $n_{\mathbf{r}\sigma}$ は数演算子である。ここで、 $t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = t(t')$ は最近接 (次近接) の飛び移り積分である [図 8 (a) 参照]。以下では、 $t = 1$ をエネルギーの単位として用いる。

ここでは、前章で議論したような対称性の破れを伴わないモット転移に加えて、磁気秩序を伴う金属絶縁体転移を議論するために、クラスター不純物模型を参照系に用いる。 (π, π) 周期構造及び、 120° 構造を持つ反強磁性秩序状態を取り扱うため、クラスターの分解は図 9(a) 及び、(c) の

ように行う。その後、相互作用の無い電子浴を、それぞれ、図 9(b) 及び、(d) のように導入する。ここで、クラスター分解に際しては、異方的三角格子 [図 8 (a)] にトポロジ的に等価な格子 [図 8(b)] を用いる。参照系のハミルトニアンは以下で与えられる。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_0(t') = & \sum_{\mathbf{R}} \left\{ \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \sum_{\sigma} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^c c_{\mathbf{r}+\mathbf{R},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}',\sigma} + \sum_{\ell=1}^{N_b} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\ell\mathbf{r}}^a a_{\ell\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} a_{\ell\mathbf{r}\sigma} \right. \\
 & \left. + \sum_{\ell=1}^{N_b} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \sum_{\sigma} V_{\ell} (c_{\mathbf{r}+\mathbf{R},\sigma}^{\dagger} a_{\ell\mathbf{r}'\sigma} + H.c.) + \sum_{\mathbf{r}} \exp(i\mathbf{r} \cdot \mathbf{Q}) \mathbf{H}_{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}} \right\},
 \end{aligned}$$

ここで、 $\sum_{\mathbf{r}}$ ($\sum_{\mathbf{R}}$) は、クラスター内の格子点 (全格子上のクラスター) を足し合わせる。クラスター中の不純物格子点数を N_c とする。また、 $\lambda = \{t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^c, \varepsilon_{\ell\mathbf{r}}^a, V_{\ell}, H_{\mathbf{Q}}\}$ は、変分パラメータであり、 $\partial\Omega/\partial\lambda = 0$ を課す。 $a_{\ell\mathbf{r}\sigma}^{\dagger}$ ($a_{\ell\mathbf{r}\sigma}$) は、スピン σ 、元の格子点 $\mathbf{r}$ と混成する $\ell (= 1, \dots, N_b)$ 番目の有効電子浴上の格子点における電子の生成 (消滅) 演算子であり、 $\mathbf{S}_{\mathbf{r}} = \frac{1}{2} c_{\mathbf{r}\uparrow}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}\downarrow}$ はスピン演算子である。ここで、 σ はパウリ行列である。磁気秩序相を取り扱うために、有効磁場 $\mathbf{H}_{\mathbf{Q}}$ を導入する。以下では主に等方的な三角格子 $t = t'$ の場合に注目する。また、全電子数 N をハーフ・フィリングに固定するため、自由エネルギー $F = \Omega - \mu N$ を考える。このため、追加の変分条件 $\partial F/\partial\mu = 0$ を考える。

前章と同様に、熱力学ポテンシャルは次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 \Omega/L = & \frac{\Omega_{\text{imp}}}{N_c} - \frac{2}{N_c} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\ell} F(\omega'_{\mathbf{r}\ell}) - \frac{2}{N_c} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\ell=1}^{N_b} F(\omega_{\ell\mathbf{r}}^a) \\
 & + \frac{2}{N_c} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\ell} F[\omega_{\mathbf{K}\mathbf{r}\ell}],
 \end{aligned} \tag{36}$$

$$F(x) = -T \ln[1 + \exp(-x/T)]. \tag{37}$$

ここで、 Ω_{imp} は参照系の熱力学ポテンシャルであり、 $\sum_{\mathbf{K}}$ は、クラスターの位置 $\mathbf{R}$ に共役な波数 $\mathbf{K}$ の還元ブリルアンゾーン内での総和を意味する。また、 $\omega_{\mathbf{K}\mathbf{r}\ell} [\omega'_{\mathbf{r}\ell}]$ は、それぞれ、グリーン関数 $g_{\mathbf{K}\mathbf{r}}(g'_{\mathbf{r}})$ の極であり、 $\omega_{\ell\mathbf{r}}^a = \varepsilon_{\ell\mathbf{r}}^a - \mu$ である。ここで、 $g_{\mathbf{K}\mathbf{r}}(g'_{\mathbf{r}})$ は、格子系 (参照系) のグリーン関数 $\bar{G}_{\mathbf{K}} (\bar{G}')$ の $\mathbf{r}$ 番目の固有値である。ただし、表記 $\bar{A}$ は、 A が $N_c \times N_c$ の行列であることを意味する。ここで、参照系のグリーン関数 $\bar{G}'$ は、

$$\bar{G}'(\omega) = [\omega + \mu - \bar{t}^c - \bar{\Delta}(\omega) - \bar{\Sigma}(\omega)]^{-1}, \tag{38}$$

$$\bar{\Delta}(\omega) = \sum_{\ell=1}^{N_b} \frac{V_{\ell\alpha}^2}{\omega - \omega_{\ell\alpha}^a} \bar{I}, \tag{39}$$

で与えられる。ここで、 $\bar{\Sigma}(\omega)$ は参照系の自己エネルギーで、 $\bar{I}$ は単位行列である。一方で、格子系のグリーン関数 $\bar{G}$ は

$$\bar{G}_{\mathbf{K}}(\omega) = [\omega + \mu - \bar{t}_{\mathbf{K}} - \bar{\Sigma}(\omega)]^{-1}, \tag{40}$$

で与えられる。ただし、 $[\bar{t}_{\mathbf{K}}]_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} t_{\mathbf{R}+\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ である。ここでも、前章と同様に、 $\bar{G}', \bar{G}'^{-1}, \bar{\Sigma}$ 及び、 $\bar{G}_{\mathbf{K}}$ のレーマン表示を求め、 $\omega_{\mathbf{K}\mathbf{r}\ell} [\omega'_{\mathbf{r}\ell}]$ を決定する。

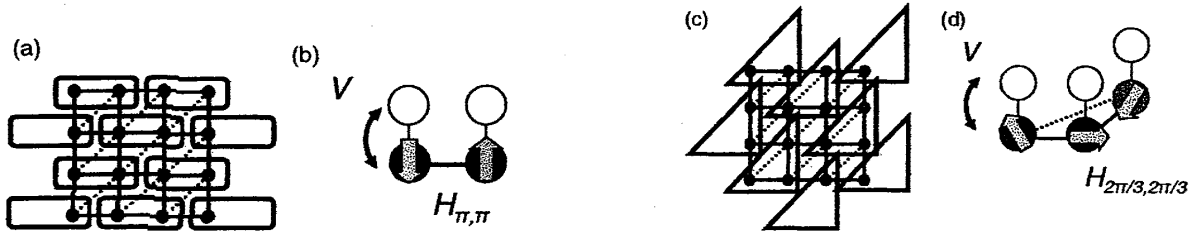


図 9: (a) [(c)] 2 (3) サイトのクラスター分解を模式的に示した図。(b) [(d)] 磁気秩序相を記述するためのクラスター不純物模型。ここで、矢印は、有効的な磁場の向きを意味する。黒 (白) 丸は、不純物 (電子浴) サイトを意味する。

本章では、磁気秩序相を特徴づけるオーダーパラメータである磁化

$$M_{\mathbf{Q}} = \frac{1}{L} \sum_j e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \langle S_{\mathbf{R}}^z \rangle \quad (41)$$

を計算する。更に、電子の局所状態密度

$$A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\text{loc}}(\omega) \quad (42)$$

を調べる。ただし、局所グリーン関数 G_{loc} は、

$$G_{\text{loc}}(\omega) = [\bar{G}_{\mathbf{R}}]_{\text{rr}}(\omega) \quad (43)$$

$$= \sum_{\mathbf{K}} [\bar{G}_{\mathbf{K}}(\omega)]_{\text{rr}} \quad (44)$$

で与えられる。

4.3 常磁性解

磁気秩序相の安定性を議論する前に、まず絶対零度における常磁性のモット転移を考える。このことは、2次元系では、熱揺らぎで磁気秩序相が抑えられるので、有限温度の性質を議論する際に重要である。ここでは、図 9(b) の不純物格子数 $N_c = 2$ のクラスター不純物模型を参照系として用いる。ここでは、 $\mathbf{H}_{\mathbf{Q}} = 0$ とする。得られた自由エネルギーを図 10 に示す。相互作用が小さい領域では ($U \lesssim 7.8$)、停留点は $V \sim 1$ 近傍に一つだけ見られる。この解は、 $U = 0$ において得られる解に滑らかに繋がるため、常磁性金属状態に対応していると考えられる。前章で述べたようにこの停留点における V の値は、電子の有効的なトランスファーに対応する。実際、相互作用が増加するとともに、連続的に小さくなる。これは、相互作用の増加と共に繰り込まれた重い準粒子状態が形成されていることを意味している。一方で、相互作用が強い領域では ($U \gtrsim 10.3$)、 V が小さいところ ($V \sim 0.2$) に別の停留点の一つだけ見られる。この解は、 $U \rightarrow \infty$ において現れる解に連続的に繋がり、常磁性絶縁体状態に対応している。この 2 つの状態は互いに競合し、二つの停留点における自由エネルギーが等しくなる $U_c \sim 9.6$ 常磁性金属と常磁性絶縁体との間の 1 次の金属絶縁体相転移が生じていることが分かる。

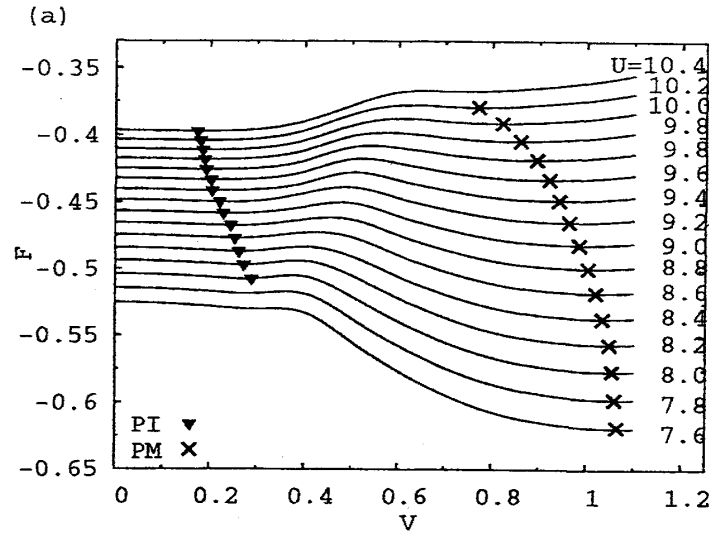


図 10: 絶対零度、ハーフ・フィリング、 $t' = 1$ での自由エネルギー F の変分パラメータ V 依存性。三角（バツ印）は常磁性絶縁体（金属）に対応する停留点。

2つの状態の性質をより明確にするために、電子の局所状態密度 $A(\omega)$ を調べた。 $U = 9$ において得られた結果を図 11 に示す。金属に対応する停留点 ($V \sim 1$) においては、フェルミ面 ($\omega = 0$) に繰り込まれた準粒子ピークが形成されていることがわかる。一方で、 $V \sim 0.2$ に現れる停留点においては、フェルミ面上には状態は見られず、絶縁体的振る舞いが確認できる。 U のエネルギースケールを持つハバードギャップの形成が見られるが、フェルミ面近傍に小さなギャップを持つ構造が見られる。このギャップは、 t^2/U 程度のエネルギースケールを持ち、短距離の相関の効果によって生じたものだと考えられる。このような振る舞いは、局所近似では見られなかった特徴であり、短距離相関を考慮して初めて捕らえることができる性質である。局所近似を用いた前章では、絶対零度においては、有効的なトランスファー（混成 V_a ）がゼロになったとき絶縁体的な振る舞いが現れた。本章では、有効的なトランスファー V が有限で絶縁体的振る舞いが見られる。これは、有効トランスファー V と、短距離相関効果 t^2/U が競合するためである。また、この競合のために、ここでは 1 次の金属絶縁体転移が生じている。

4.4 磁気不安定性

前述の結果は、絶対零度において、常磁性絶縁体解が基底状態として安定に存在する事を示しているわけではない。次に、基底状態を明らかにするために、参照系に対称性を破る磁場 (H_Q) を導入して、磁気不安定性を議論する。ここでは、正方格子で期待される (π, π) の構造を持つ反強磁性絶縁体、及び、三角格子で期待される 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体を取り扱う。そこで、図 9 (b) 及び (d) に示す参照系を用いて、先に議論した常磁性解に加えて、磁気秩序を持つ解の自由エネルギーを計算した。結果を図 12 に示す。常磁性金属相が、相互作用が小さい領域で安定である。一方で、相互作用が強い領域では、 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体が最も安定に存在する。

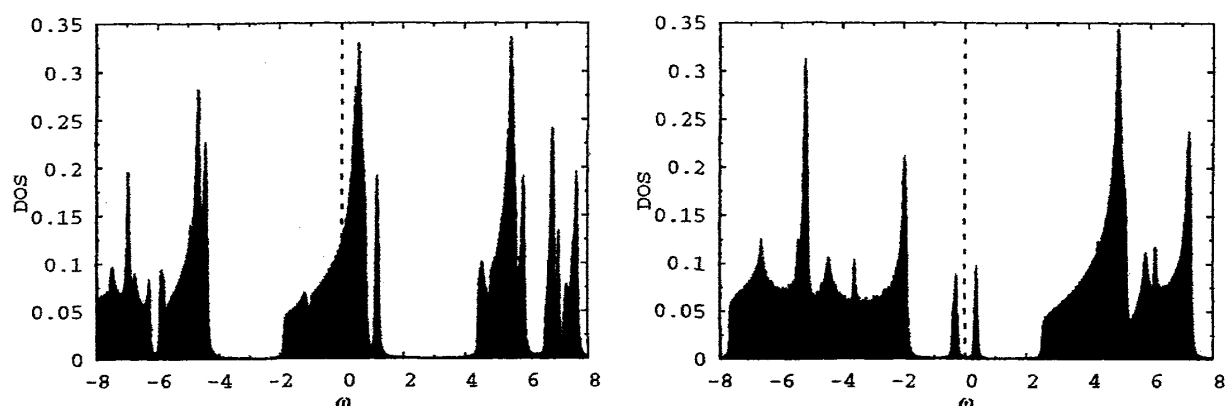


図 11: 絶対零度、ハーフ・フィリング、 $t' = 1$ 、 $U = 9$ における金属解 ($V \sim 1$) および絶縁体解 ($V \sim 0.2$) の状態密度。

このことは、強相関の極限である三角格子ハイゼンベルグ模型で期待される結果とコンシステントである。また、 $U_c \sim 8.4$ において、常磁性金属と 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体の自由エネルギーの交差が見られ、対称性の破れを伴う1次の金属絶縁体相転移が生じていることが分かる。この結果は、今回用いた自己エネルギー汎関数法の枠組みでは、非磁性絶縁体状態は、基底状態としては現れないことを示している。しかしながら、常磁性金属が安定な領域 ($7.7 \lesssim U \lesssim 8.4$) において、非磁性絶縁解が準安定解として存在している。

次に、 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体及び、 (π, π) の構造を持つ反強磁性絶縁体の磁化 M_Q を調べた結果を図 12(b) に示す。 $U = 0$ から相互作用を増加していくと、 $U \sim 7.5$ 付近で磁化 M に大きな飛びを伴って有限の値をとり、常磁性金属状態から 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体へと転移する。転移点近傍では、フラストレーションの効果で磁気秩序が抑制され、繰り込まれた金属が実現している。このような状態は、局所的なスピン揺らぎが強く、磁氣的に活性であるため、磁化に大きな飛びを伴うと考えられる。

4.5 異方的三角格子上ハバード模型の相図

同様の解析を t' を変化させながら行い、異方的三角格子上のハーフ・フィリングのハバード模型を調べた結果を、図 13 の相図にまとめる。相互作用が小さい領域では、 $t' \neq 0$ において常磁性金属状態が安定である。一方で、相互作用が強い領域では、 (π, π) 周期構造を持つ反強磁性絶縁体と、 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体が競合し、 $t'_c \sim 0.8$ で相転移が生じる。これらの結果は、変分モンテカルロ法で得られたものと良く一致している [51]。ここでは更に、準安定な非磁性絶縁解の存在する境界を調べた。図 13 の破線で示したように、 120° 構造を持つ反強磁性絶縁相近傍に、準安定な非磁性絶縁解が存在している。そのため、このパラメータ領域において、断熱的にこの系の温度を下げていくと、この準安定な非磁性絶縁解が絶対零度においても出現する可能性があることを示唆している。

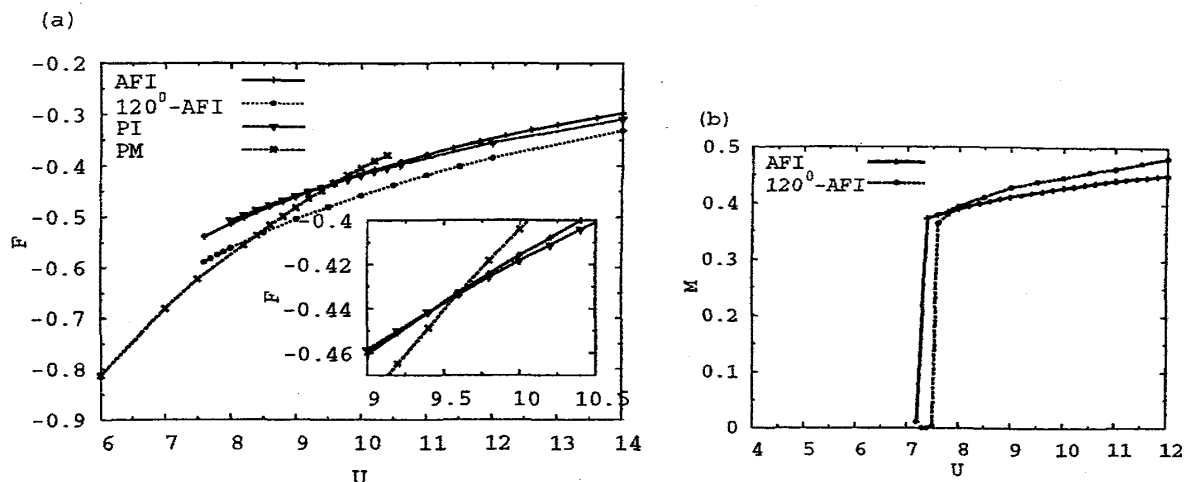


図 12: (a) 絶対零度、ハーフ・フィリング、 $t' = 1$ での、4つの物理的状態に対する自由エネルギー F の相互作用 U 依存性。挿入図は、 $U \sim 9.5$ 付近の拡大図である。AFI 及び、 120° -AFI は、 (π, π) の構造を持つ反強磁性絶縁体及び、 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体を意味する。PI 及び、PM は常磁性絶縁体及び常磁性金属状態を意味する。(b) AFI 及び、 120° -AFI における磁化。

4.6 まとめ

本章では、クラスター不純物模型を参照系に用いて、絶対零度における異方的三角格子上的ハーフ・フィリングのハバード模型に関する解析を行った。常磁性金属状態と、 (π, π) 及び 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体の競合を議論した。その結果、相互作用が大きい領域では、 $t' \lesssim 0.8$ で (π, π) 周期構造を持つ反強磁性絶縁体が安定になり、一方で、 $t' \gtrsim 0.8$ で 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体が安定になることが分かった。また、相互作用の小さい領域では、 $t' \sim 0$ を除いて金属状態が安定であることが分かった。今回用いた近似の枠組みでは、非磁性の絶縁体状態は基底状態として存在しないことが明らかになった。しかしながら、準安定な非磁性の絶縁解が、 120° 構造を持つ反強磁性絶縁体相の近傍に見られた。このことは、熱揺らぎなどの摂動により非磁性の絶縁体が現れる可能性を示唆しており、今後更なる解析が必要とされる。

本章で用いた参照系には、モット転移を特徴づける混成 V に加えて、自発的な対称性の破れを有効的に記述する磁場 H_Q を導入した。得られた結果は、変分モンテカルロ法などの他の方法により得られた結果と定性的に一致しており、これらのパラメータの競合を調べることで、常磁性金属、常磁性絶縁体、磁気秩序を伴う絶縁体の競合を記述できることを示唆している。参照系には、磁気的秩序以外にも、超伝導秩序、電荷秩序などの対称性の破れを有効的に記述する場を自由に導入できる。そのため、自己エネルギー汎関数法は、常磁性のモット絶縁体までふくめた様々な秩序状態の競合を有効的に調べる手段となり得る。

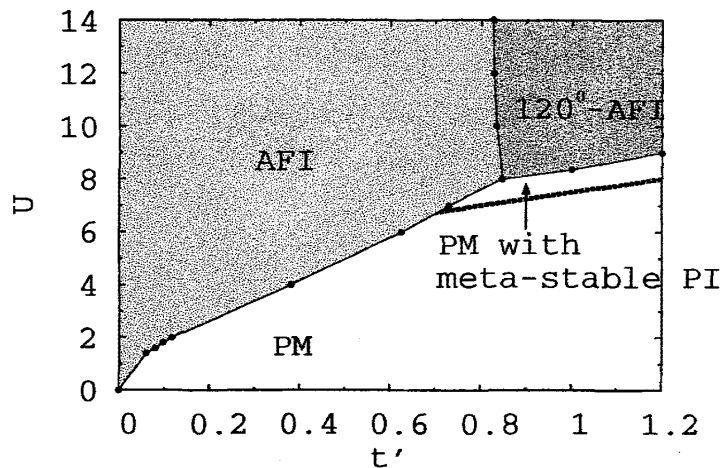


図 13: 異方的三角格子上的ハーフ・フィリングのハバード模型の絶対零度での相図。白色の領域は、常磁性金属相を薄い灰色の領域は (π, π) 周期構造を持つ反強磁性絶縁相を意味し、濃い灰色の領域は、 120° 構造を有する反強磁性絶縁相を意味する。また、破線は、相互作用 U を減少させた時に、準安定な非磁性絶縁相が消滅する臨界点を意味する。

5 結言

自己エネルギー汎関数法は、ラッティンジャー・ワードの定式化に基づく変分原理を利用して、対象とする系の自己エネルギーを変分的に決定する近似法である。試行関数の役割をする自己エネルギーは、対象とする系と同じ相互作用項を持つ参照系において厳密に求められる必要がある。この自己エネルギーを通して非摂動的に相互作用の効果を取り入れることができる。また、ここで用いた変分原理は、系のグリーン関数が満たすべき因果律や保存則を保証する。更に、熱揺らぎの効果を自然に取り入れることも可能であるため、絶対零度から有限温度まで系統的な解析ができる。また、参照系の自由度を小さく制限することで、軌道縮退系などの複雑な模型に適用することができる。さらに、短距離の相関を取り入れたうえ、対称性の破れた秩序状態を取り扱うことも可能である。一方で、参照系の選び方に答えが依存するという変分法特有の欠点も有する。参照系に不純物模型を選べば動的平均場近似の枠組みが再現され、クラスター模型を選べばクラスター摂動展開の枠組みが再現される。すなわち、この変分法特有の「欠点」は、強相関系を取り扱う様々な方法を統一的枠組みで記述するという「利点」とも捉えられる。

このような利点を持つため自己エネルギー汎関数法は、モット転移などの強相関電子系における相転移を調べる際に非常に有用な手段となりうる。本稿では、軌道縮退を有する系における有限温度のモット転移、及び、フラストレーションを有する系における絶対零度のモット転移を解析した結果を紹介した。ここでは、参照系に不純物模型及びクラスター不純物模型を用いた。そして、参照系の一部の変分パラメータは、有効的にモット転移や磁気転移を特徴づけるオーダーパラメータに対応することを述べた。このことを利用して、2つの模型において有限温度及び、絶対零度の相図を決定した。

このように、自己エネルギー汎関数法は、さまざまな系に応用が可能で、更に、絶対零度から有限温度まで系統的解析が可能である。モット転移などの強相関における相転移の本質を理解するためには、多様な問題に対して統一的な枠組みで議論することが重要であると考えられる。自己エネルギー汎関数法は、そのような統一的・系統的解析を行うことのできる数少ない方法の中の一つであり、更なる応用が期待される。

付録 A: グリーン関数の極を求める

ここでは、グリーン関数の極を数値的に正確に求める方法について述べる。以下では、第3章で取り上げたハミルトニアン (20) 式で与えられる参照模型を念頭において説明する。ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{ref}}^{(i)}$ で与えられる系のグリーン関数 $G_{\alpha\sigma}(\omega)$ は、レーマン展開の表式

$$G_{\alpha\sigma}(\omega) = \sum_{nm} \frac{(e^{\beta(\Omega-E_n)} + e^{\beta(\Omega-E_m)}) |\langle n | c_{\alpha\sigma}^\dagger | m \rangle|^2}{\omega - (E_n - E_m)} \quad (45)$$

で記述される。ここで、 $\Omega = -T \ln \text{tr} \mathcal{H}_{\text{ref}}^{(i)}$ は系の熱力学ポテンシャルである。また、 $|m\rangle$ は $\mathcal{H}_{\text{ref}}^{(i)}$ の固有状態であり、 E_m は対応する固有値である。この表式を極 $p_{\alpha\sigma\ell} = E_n - E_m$ 及び、留数 $R_{\alpha\sigma\ell} = (e^{\beta(\Omega-E_n)} + e^{\beta(\Omega-E_m)}) |\langle n | c_{\alpha\sigma}^\dagger | m \rangle|^2$ を用いて次のように書き換える。ここで、極を昇順に並び変えてインデックスを ℓ を付与しなす。

$$G_{\alpha\sigma}(\omega) = \sum_{\ell=1}^{N_{\text{pole}}} \frac{R_{\alpha\sigma\ell}}{\omega - p_{\alpha\sigma\ell}} \quad (46)$$

ここで、 N_{pole} は極の数である。次に、 $G_{\alpha\sigma}$ の逆関数 $G_{\alpha\sigma}^{-1}$ を考える。グリーン関数の $G_{\alpha\sigma}(\omega \rightarrow \infty) \propto 1/\omega$ 及び、 $\sum_{\ell} R_{\alpha\sigma\ell} = 1$ という性質を用いると、 $G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)$ は、

$$G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega) = \omega + C_{\alpha\sigma}^{G^{-1}} + \sum_{\ell=1}^{N_{\text{zero}}} \frac{R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}}}{\omega - z_{\alpha\sigma\ell}} \quad (47)$$

で与えられる。ここで、 $z_{\ell} (R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}})$ は $G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)$ の極 (留数) であり、 $C_{\alpha\sigma}^{G^{-1}}$ は定数項である。ここで、 $G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)$ の極 $z_{\alpha\sigma\ell}$ は、グリーン関数 $G_{\alpha\sigma}(\omega)$ の零点に対応する。ここで、(46) 式で与えられるグリーン関数は、 $R_{\alpha\sigma\ell} > 0$ であることから、図 14 に示すように $p_{\alpha\sigma\ell}$ と $p_{\alpha\sigma,\ell+1}$ の間に必ず 1 つだけ零点 $z_{\alpha\sigma\ell}$ を持つことに注目する。この性質を利用すれば、2 分法やニュートン法などの手法を用いて零点は容易に求めることができる。そして、次式を用いて $G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)$ の留数 $R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}}$ を求める。

$$R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}} = \lim_{\omega \rightarrow z_{\alpha\sigma\ell}} (\omega - z_{\alpha\sigma\ell}) G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega) \quad (48)$$

$$= \lim_{\omega \rightarrow z_{\alpha\sigma\ell}} \left(\frac{\partial G_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial \omega} \right)^{-1} \quad (49)$$

最後に、定数項 $C_{\alpha\sigma}^{G^{-1}}$ は、(46) 式と (56) 式を比較すれば求まる。そして、ダイソン方程式を用いれば、自己エネルギーを同様の形式

$$\Sigma_{\alpha\sigma}(\omega) = C_{\alpha\sigma}^{\Sigma} + \sum_{\ell=1}^{N_{\text{zero}}} \frac{R_{\alpha\sigma\ell}^{\Sigma}}{\omega - z_{\alpha\sigma\ell}} \quad (50)$$

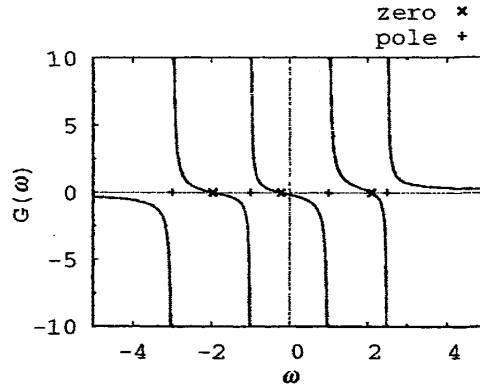


図 14: グリーン関数の極と零点。

で求めることができる。

ここから更に、元の系のグリーン関数 $G_{\alpha\sigma}(\omega; z) = [\omega + \mu - z - \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)]^{-1}$ も同様の手順を逆に辿れば求めることができる。グリーン関数 $G_{\alpha\sigma}(\omega; z)$ が以下のように与えられるとする。

$$G_{\alpha\sigma}(\omega; z) = \sum_{\ell=1}^{N_{pole}(z)} \frac{R_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\omega - p_{\alpha\sigma\ell}(z)} \quad (51)$$

ここで、 $N_{pole}(z)$ 、 $p_{\alpha\sigma\ell}(z)$ 及び、 $R_{\alpha\sigma\ell}(z)$ はグリーン関数 $G_{\alpha\sigma}(\omega; z)$ の極の数、極、及び留数である。また、

$$R_{\alpha\sigma\ell}(z) = \lim_{\omega \rightarrow p_{\alpha\sigma\ell}(z)} \left(1 - \frac{\partial \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial \omega} \right)^{-1} \quad (52)$$

を用いる。

ここでは、第3章で用いた不純物模型系を参照系として用いた場合を念頭において解説した。このときのグリーン関数はスピン σ 及び軌道 α で対角化されている。しかしながら、第4章で参照系として用いたクラスター不純物模型においては、不純物間に飛び移りが存在するためグリーン関数は非対角な要素を持つ。上述の定式化は非対角な要素を持つグリーン関数に対しても容易に拡張することができる。

付録 B: グリーン関数の極の微分を求める

ここでは、エントロピー等の物理量を求める際に必要な、グリーン関数の極の微分を求める方法を述べる。付録 A に引き続き、第3章で取り上げたハミルトニアン (20) 式で与えられる参照模型を念頭において説明する。まず、(46) 式で与えられるグリーン関数の任意のパラメータ λ による微分

$$\frac{\partial G_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial \lambda} = \sum_{\ell=1}^{N_{pole}} \frac{\frac{\partial R_{\alpha\sigma\ell}}{\partial \lambda}}{\omega - p_{\alpha\sigma\ell}} + \sum_{\ell=1}^{N_{pole}} \frac{\frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}}{\partial \lambda} R_{\alpha\sigma\ell}}{(\omega - p_{\alpha\sigma\ell})^2} \quad (53)$$

を考える。ここで、グリーン関数が (45) 式のようにレーマン形式で与えられていれば、 $\frac{\partial R_{\alpha\sigma\ell}}{\partial\lambda}$ 及び、 $\frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}}{\partial\lambda}$ は容易に求めることができる。温度 T での微分を例にとって考えれば ($\lambda = T$)、

$$\frac{\partial R_{\alpha\sigma\ell}}{\partial T} = -\frac{1}{T^2} \left[\left(\langle \mathcal{H}_{ref}^{(i)} \rangle - E_n \right) e^{\beta(\Omega - E_n)} + \left(\langle \mathcal{H}_{ref}^{(i)} \rangle - E_m \right) e^{\beta(\Omega - E_m)} \right] |\langle n | c_{\alpha\sigma}^\dagger | m \rangle|^2 \quad (54)$$

$$\frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}}{\partial T} = 0 \quad (55)$$

である。

次に、グリーン関数の逆関数の微分

$$\frac{\partial G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)}{\partial\lambda} = \frac{\partial C_{\alpha\sigma}^{G^{-1}}}{\partial\lambda} + \sum_{\ell=1}^{N_{zero}} \frac{\frac{\partial R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}}}{\partial\lambda}}{\omega - z_{\alpha\sigma\ell}} + \sum_{\ell=1}^{N_{zero}} \frac{\frac{\partial z_{\alpha\sigma\ell}}{\partial\lambda} R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}}}{(\omega - z_{\alpha\sigma\ell})^2} \quad (56)$$

を考える。ここで、

$$\lim_{\omega \rightarrow z_{\alpha\sigma\ell}} (\omega - z_{\alpha\sigma\ell})^2 \frac{\partial G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)}{\partial\lambda} = \frac{\partial z_{\alpha\sigma\ell}}{\partial\lambda} R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}} \quad (57)$$

となることに注目して、左辺の $\frac{\partial G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)}{\partial\lambda}$ を、

$$\frac{\partial G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)}{\partial\lambda} = -[G_{\alpha\sigma}(\omega)]^2 \frac{\partial G_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial\lambda} \quad (58)$$

と変形すると、

$$\frac{\partial z_{\alpha\sigma\ell}}{\partial\lambda} = -R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}} \frac{\partial G_{\alpha\sigma}(z_{\alpha\sigma\ell})}{\partial\lambda} \quad (59)$$

が得られる。次に、(49) 式の両辺を λ で微分すると、

$$\frac{\partial R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}}}{\partial\lambda} = -\left(R_{\alpha\sigma\ell}^{G^{-1}}\right)^2 \left[\frac{\partial^2 G_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial\lambda\partial\omega} + \frac{\partial z_{\alpha\sigma\ell}}{\partial\lambda} \frac{\partial^2 G_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial\omega^2} \right]_{\omega \rightarrow z_{\alpha\sigma\ell}} \quad (60)$$

が得られる。また、 $\frac{\partial C_{\alpha\sigma}^{G^{-1}}}{\partial\lambda}$ は、(56) 式と (58) 式を比較して求める。以上より、グリーン関数の逆関数の微分 $\frac{\partial G_{\alpha\sigma}^{-1}(\omega)}{\partial\lambda}$ が求められる。ダイソン方程式を用いれば、自己エネルギーの微分 $\frac{\partial \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial\lambda}$ を求めることができる。

最後に元の系のグリーン関数 $G_{\alpha\sigma}(\omega; z) = [\omega + \mu - z - \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)]^{-1}$ の微分を考える。ここで、(53) 式と同様の形式を考えると、

$$\frac{\partial G_{\alpha\sigma}(\omega; z)}{\partial\lambda} = \sum_{\ell=1}^{N_{pole}(z)} \frac{\frac{\partial R_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\partial\lambda}}{\omega - p_{\alpha\sigma\ell}(z)} + \sum_{\ell=1}^{N_{pole}(z)} \frac{\frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\partial\lambda} R_{\alpha\sigma\ell}(z)}{[\omega - p_{\alpha\sigma\ell}(z)]^2} \quad (61)$$

である。次に、

$$\lim_{\omega \rightarrow p_{\alpha\sigma\ell}(z)} (\omega - p_{\alpha\sigma\ell}(z))^2 \frac{\partial G_{\alpha\sigma}(\omega; z)}{\partial\lambda} = \frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\partial\lambda} R_{\alpha\sigma\ell}(z) \quad (62)$$

となることに注目し、左辺の $\frac{\partial G_{\alpha\sigma}(\omega; z)}{\partial\lambda}$ を、

$$\frac{\partial G_{\alpha\sigma}(\omega; z)}{\partial\lambda} = -[G_{\alpha\sigma}(\omega; z)]^{-2} \frac{\partial}{\partial\lambda} [\omega + \mu - z - \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)]_{\omega \rightarrow p_{\alpha\sigma\ell}(z)} \quad (63)$$

と変形すると、

$$\frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\partial \lambda} = -R_{\alpha\sigma\ell}(z) \frac{\partial}{\partial \lambda} [\omega + \mu - z - \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)]_{\omega \rightarrow p_{\alpha\sigma\ell}(z)} \quad (64)$$

が得られる。次に、(52) 式を両辺 λ で微分すると、

$$\frac{\partial R_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\partial \lambda} = [R_{\alpha\sigma\ell}(z)]^2 \left[\frac{\partial^2 \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial \lambda \partial \omega} + \frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\partial \lambda} \frac{\partial^2 \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial \omega^2} \right]_{\omega \rightarrow p_{\alpha\sigma\ell}(z)} \quad (65)$$

が得られる。以上で、格子系グリーン関数 $G_{\alpha\sigma}(\omega; z)$ の微分を求めることができる。

ここで求めたグリーン関数や自己エネルギーの微分を用いると、熱力学ポテンシャルの微分 $\partial \Omega / \partial \lambda$ を数値差分を用いずに解析的な形式で求めることができる。これにより、熱力学ポテンシャルを 1 階微分すれば求めることができるエントロピーや 2 重占有率等の物理量を精度良く求めることができる。更に、自己エネルギー汎関数法の変分定理 $\partial \Omega / \partial t' = 0$ を満たす停留点を探す際も、解析微分を用いることで収束速度を向上させることができる。

付録 C: グリーン関数の極の性質の利用

付録 A, B で述べた方法で、グリーン関数の極や零点及び、その微分を求めると、数値計算の精度を向上することができる。加えて、グリーン関数の極の性質を利用すれば、数値計算速度を改善することができる。ここでは、第 3 章で用いたアルゴリズムを紹介する。

まず、数値計算の実行時間を整理する。実際の数値計算において最もループが深く、実行時間がかかるのは、(21) 式中の z 積分である。まず、計算のオーダーを簡単に整理しておく。ここで、グリーン関数の極を 2 分法で ϵ の精度まで収束させるとする。また、 $N_{pole} \sim N_{pole}(z) \sim N_{zero}$ なので、これらをまとめて N と表記し、極の中で絶対値が最大のものを p_{max} とする。このとき、グリーン関数の極及び留数をすべて求めて、(51) 式の形式を導出するのに必要な計算回数は $O(N^2 \log_2 \frac{2|p_{max}|}{N\epsilon})$ である。そのため、積分回数を M とすると、 z 積分で必要な計算回数は $O(MN^2 \log_2 \frac{2|p_{max}|}{N\epsilon})$ である。

ここで、(64) 式において、 $\lambda = z$ を考えると、

$$\frac{\partial p_{\alpha\sigma\ell}(z)}{\partial z} = R_{\alpha\sigma\ell}(z) \quad (66)$$

$$= \left[1 - \frac{\partial \Sigma_{\alpha\sigma}(\omega)}{\partial \omega} \right]_{\omega \rightarrow p_{\alpha\sigma\ell}(z)}^{-1} \quad (67)$$

という関係式が得られる。これを用いると、(51) 式の形式を導出するのに必要な計算回数は $O(N^2)$ となる。これにより、 z 積分で必要な計算回数はたかだか $O(MN^2)$ となる。更に、(67) 式は、極 $p_{\alpha\sigma\ell}(z)$ を N 個の独立な微分方程式の解として与えられることを意味する。この微分方程式の右辺は、グリーン関数の留数であるので、 $[0, 1]$ の間しか取らないことが保障されており、この微分方程式の解は数値的に安定で求めやすい。ここで、ルンゲ・クッタ法などの微分方程式の解を求める適当なアルゴリズムを用いると更に高速化できる。

謝辞

大阪大学理学研究科の大橋琢磨助教には、研究初期の段階から多くの御助力頂いた事を深く感謝いたします。また、理化学研究所の田中洋一氏には多くのディスカッションを通して有益なご議論を頂きました。深く感謝致します。最後に、研究のみならず日々の生活の中で大変お世話になりました宮下哲氏、阪野壘氏をはじめとする研究室の皆様にご心より感謝致します。

参考文献

- [1] M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **32** (2003), 429.
- [2] M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **36** (2003), 335.
- [3] K. Inaba, A. Koga, S. Suga and N. Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005), 2393.
- [4] K. Inaba, A. Koga, S. Suga and N. Kawakami; arXiv/0809.2383.
- [5] A. Koga, K. Inaba and N. Kawakami, Prog. Theor. Phys. Suppl. **160** (2005), 253.
- [6] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transition* (Taylor & Francis, London, 1990) 2nd ed.
- [7] F. Gebhard, *The Mott Metal-Insulator Transition* (Springer, Berlin, 1997) Vol. 137 of *Springer Tracts in Modern Physics*.
- [8] M. Imada, A. Fujimori and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70** (1998), 1039.
- [9] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London A **277** (1963), 237.
- [10] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London A **281** (1964), 401.
- [11] M. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10** (1963), 159.
- [12] M. Gutzwiller, Phys. Rev. **137** (1965), A1726.
- [13] W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B **2** (1970), 4302.
- [14] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68** (1996), 13.
- [15] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B **7** (1973), 1920.
- [16] S. A. Carter, T. F. Rosenbaum, J. M. Honig and J. Spalek, Phys. Rev. Lett. **67** (1992), 3440.
- [17] S. A. Carter, T. F. Rosenbaum, P. Metcalf, J. M. Honig and J. Spalek, Phys. Rev. B **48** (1993), 16841.

- [18] M. J. Rozengerg, G. Kotliar, H. Kajueter, G. A. Thomas, G. H. Rapkine, J. M. Honig and P. Metcalf, Phys. Rev. Lett. **75** (1995), 105.
- [19] G. Kotliar and D. Vollhardt, Phys. Today **57**(3) (2004), 53.
- [20] A. Liebsch, Europhys. Lett. **63** (2003), 97.
- [21] A. Liebsch, Phys. Rev. Lett. **91** (2003), 226401.
- [22] A. Liebsch, Phys. Rev. B **70** (2004), 165103.
- [23] M. Sigrist and M. Troyer, Eur. Phys. J. B **39** (2004), 207.
- [24] Z. Fang, N. Nagaosa and K. Terakura, Phys. Rev. B **69** (2004), 45116.
- [25] V. I. Anisimov, I. A. Nekrasov, D. E. Kondakov, T. M. Rice and M. Sigrist, Eur. Phys. J. B **25** (2002), 191.
- [26] A. Koga, N. Kawakami, T. M. Rice and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **92** (2004), 216402.
- [27] A. Koga, N. Kawakami, T. M. Rice and M. Sigrist, Phys. Rev. B **72** (2005), 045128.
- [28] R. Arita and K. Held, Phys. Rev. B **72** (2005), 201102(R).
- [29] C. Knecht, N. Blümer and P. G. J. van Dongen, Phys. Rev. B **72** (2005), 081103(R).
- [30] P. Lu, Phys. Rev. B **49** (1994), 5687.
- [31] M. Ferrero, F. Becca, M. Fabrizio and M. Capone, Phys. Rev. B **72** (2005), 205126.
- [32] S. Biermann, L. de' Medici and A. Georges, Phys. Rev. Lett. **95** (2005), 206401.
- [33] R. Chitra and G. Kotliar, Phys. Rev. B **63** (2001), 115110.
- [34] G. Kotliar, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87** (2001), 186401.
- [35] M. H. Hettler, *et al.*, Phys. Rev. B **58** (1998), 7475.
- [36] 倉本義夫, 清水幸弘, 固体物理 **39** (2004), No. 7.
- [37] S. Nakatsuji and Y. Maeno, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 2666.
- [38] S. Nakatsuji and Y. Maeno, Phys. Rev. Lett. **90** (2003), 137202.
- [39] K. Sreedhar, M. McElfresh, D. Perry, D. Kim, P. Metcalf and J. M. Honig, J. Solid State Chem. **110** (1994), 208.
- [40] Z. Zhang, *et al.*, J. Solid State Chem. **108** (1994), 402.

- [41] Z. Zhang and M. Greenblatt, J. Solid State Chem. **117** (1995), 236.
- [42] Y. Kobayashi, S. Taniguchi, M. Kasai, M. Sato, T. Nishioka and M. Kontani, J. Phys. Soc. Jpn **65** (1996), 3978.
- [43] Y. Murakami, Synchrotron Radiation News **17** (2004), 22.
- [44] L. de' Medici, A. Georges and S. Biermann, Phys. Rev. B **72** (2005), 205124.
- [45] 古賀昌久, 川上則雄, T. M. Rice, M. Sigrist, 固体物理 **39** (2004), No. 7.
- [46] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato and G. Sato, Phys. Rev. Lett. **91** (2003), 107001.
- [47] F. Kagawa and *et. al.*, Phys. Rev. B **69** (2004), 064511.
- [48] T. Ohashi, T. Momoi, H. Tsunetsugu and N. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **100** (2008), 076402.
- [49] B. Kyung and A. S. Tremblay, Phys. Rev. Lett. **97** (2006), 046402.
- [50] T. Koretsune, Y. Motome and A. Furusaki, J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007), 074719.
- [51] T. Watanabe, H. Yokoyama, Y. Tanaka and J. Inoue; arXiv/0711.1702.
- [52] T. Kahima and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001), 3052.
- [53] T. Mizusaki and M. Imada, Phys. Rev. B **74** (2006), 014421.
- [54] H. Morita, S. Watanabe and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002), 2109.
- [55] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **118** (1960), 1417.
- [56] 高田康民, 多体問題 (朝倉書店, 東京, 1999).
- [57] G. Baym and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. **124** (1961), 287.
- [58] M. Potthoff, M. Aichhorn and C. Dahnken, Phys. Rev. Lett. **91** (2003), 206402.
- [59] K. Pozgajčić, cond-mat/0407172.
- [60] R. Bulla, Phys. Rev. Lett. **83** (1999), 136.
- [61] M. Jarrell, Phys. Rev. Lett. **69** (1992), 168.
- [62] M. Caffarel and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **72** (1994), 1545.

- [63] G. Moeller, Q. Si, G. Kotliar, M. Rozenberg and D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **74** (1995), 2082.
- [64] P. Phillips, Ann. Phys. **321** (2006), 1634.
- [65] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrigoni and M. Potthoff, Phys. Rev. B **70** (2004), 245110.
- [66] D. Sénéchal and *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 522.
- [67] D. Sénéchal and *et. al.*, Phys. Rev. B **66** (2002), 075129.
- [68] P. Sahebsara and D. Sènechal, Phys. Rev. Lett. **97** (2006), 257004.
- [69] M. Aichhorn and E. Arrigoni, Europhys. Lett. **72** (2005), 117.
- [70] M. Aichhorn, H. G. Evertz, W. von der Linden and M. Potthoff, Phys. Rev. B **70** (2004), 235107.
- [71] M. Aichhorn, E. Y. Sherman and H. G. Evertz, Phys. Rev. B **72** (2005), 155110.
- [72] D. Senechal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois and A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. Lett. **94** (2005), 156404.
- [73] A. H. Nevidomskyy and *et. al.*, Phys. Rev. B **77** (2008), 064427.
- [74] J. M. Williams, J. R. Ferraro, R. J. Thorn, K. D. Carlson, U. Geiser, H. H. Wang, A. M. Kini and M.-H. Whangbo, *Organic Superconductors (Including Fullerenes: Synthesis, Structure, Properties, and Theory)* .
- [75] T. Ishiguro, K. Yamaji and G. Saito, *Organic Superconductors* .
- [76] N. H. Tong, Phys. Rev. B **72** (2005), 115104.
- [77] O. Morsch and M. Oberthaler, Rev. Mod. Phys. **78** (2006), 179.
- [78] I. Bloch and M. Greiner, *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics* Vol. 52.
- [79] S. Okamoto and A. J. Millis, Phys. Rev. B **70** (2004), 195120.
- [80] A. Koga, T. Higashiyama, K. Inaba, S. Suga and N. Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008), 073602.
- [81] M. Snoek, I. Titvinidze, C. Toke, K. Byczuk and W. Hofstetter, New J. Phys. **10** (2008), 093008.

- [82] M. Balzer and M. Potthoff, *Physica B* **359-361** (2005), 768.
- [83] M. Potthoff and M. Balzer, *Phys. Rev. B* **75** (2007), 125112.
- [84] W. Koller, D. Meyer, Y. Ono and A. C. Hewson, *Europhys. Lett.* **66** (2004), 559.
- [85] W. Koller, D. Meyer, A. C. Hewson and Y. Ono, *Physica B* **359-361** (2005), 795.
- [86] K. Inaba, A. Koga, S.-I. Suga and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **72** (2005), 085112.
- [87] K. Inaba and A. Koga, *Phys. Rev. B* **73** (2006), 155106.
- [88] S. Kondo, D. C. Johnston, C. A. Swenson, F. Borsa, A. V. Mahajan, L. L. Miller, T. Gu, A. I. Goldman, M. B. Maple, D. A. Gajewski, E. J. Freeman, N. R. Dilley, R. P. Dickey, J. Merrin, K. Kojima, G. M. Luke, Y. J. Uemura, O. Chmaissem and J. D. Jorgensen, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 3729.