

## 非磁性モット転移のメカニズムの解明---ダブロン-ホロン束縛効果

身の回りの物質は、金属であるか絶縁体または半導体であるかという電気的性質によって大別され、これらの性質をうまく組み合わせて高度な科学技術が進展している。しかし、物質が金属（導体）となるのか絶縁体になるのかという基本的な問題については、簡単な場合を除いて、まだまだ分かっていないことが多い。固体中の電子は、動き回ることによって持つ運動エネルギー ( $W$ ) と、電子間クーロン力による斥力エネルギー ( $U$ ) の2つを持っている。運動エネルギーの方が優勢であれば金属であるが、クーロン斥力エネルギーが優勢になると、ある  $U/W$  の値から絶縁体になるという可能性がある。このような金属-絶縁体転移については、20 世紀中頃にイギリスのモットが提唱したので、モット金属-絶縁体転移と呼ばれている。また絶縁体状態はモット絶縁体と呼ばれる。その後の長い研究の歴史があるが、最近の研究で二重占有サイト（ダブロン）-空サイト（ホロン）間束縛効果というものが、本質的にモット金属-絶縁体転移にとって重要なことが明らかになりつつある。

ところで、多くのモット絶縁体（電子系）では低温で磁気秩序（特に反強磁性秩序）が発現するため、単純なモット転移と磁気スレーター転移 ( $U/W \rightarrow 0$  極限でも起こり得る）を弁別することは難しい。その一方で、銅酸化物の高温超伝導は母物質のモット絶縁体に少量のキャリアをドーブした非磁性状態で現れることや、最近の有機超伝導体 ( $\kappa$ -ET 塩) で磁気秩序を伴わないモット転移が見出されたことなどから、磁性を伴わないモット転移のメカニズムについて理解を深める必要性が出てきた。

さらにレーザー照射により極低温 ( $\sim 10^{-7}$  K) に冷却したアルカリ原子気体の研究でも、モット転移の研究は大きな進展を見せている。冷却した  $^{87}\text{Rb}$  などのボソン原子種を、レーザーの定在波で作った周期的電磁ポテンシャル（光学格子）に閉じ込めた系では、粒子密度や相互作用の強度を外場の調節などによって変えられるため、様々な格子上での超流動-絶縁体転移（ボース粒子のモット転移に対応する）が見出されている。また、最近になって量子ガス顕微鏡という方法で、各格子点を占有する粒子数のパリティ（偶数か奇数か）が測定され、転移点近傍での粒子配置を可視化することもできるようになった。このように、スピンの 0 であるようなスピン自由度のないボース系のモデルは、冷却原子のモデルであるばかりでなく、広く非磁性モット転移を調べるために重要である。このモデルに関して、既に量子モンテカルロ法や強相関展開などでモット転移点の値や基底状態の相図が得られているが、転移のメカニズムは未だ明らかではなかった。

最近、東北大学大学院理学研究科の横山寿敏氏、宮川智章氏と東京大学大学院理学系研究科の小形正男氏は、変分モンテカルロ（VMC）法を用いて、2次元  $S=0$  ボースハバードモデルにおけるモット転移の性質を詳しく調べ、ダブロン-ホロン間の束縛および解放がモット転移の本質であることを確認した。さらに、二つの特徴的距離スケールを導入して、非磁性モット転移を一般的に説明する定量的描像を与え、この描像の下でモット転移点を決定できることを示した。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 *Journal of the Physical Society of Japan* (JPSJ) の 2011 年 8 月号に掲載された。

VMC 法とは、多体変分法の期待値をモンテカルロ法により数値的に厳密に計算する方法で、あらゆる  $U/W$  値で定量的な結果が得られる。この研究では試行波動関数の多体相関因子に数

種類のダブロン-ホロン間束縛因子（以下 D-H 因子と呼ぶ）が導入された。ダブロンとホロンは平均粒子密度を基準にすると、それぞれ正と負の粒子密度を持つので、D-H 因子は系の伝導性に本質的な役割を果たす。VMC 法の結果では、D-H 因子を導入すると 1 次のモット転移が起きていることが確認された。

これを基に様々なモット転移を統一的に理解するための描像が導入された。図 1 の淡色の円は、D-H 対の特徴的大きさをしめす束縛長  $\xi_{dh}$  を表す。さらに、もう 1 つの特徴的な長さのスケールとして、図 1 のように最低 D-D 距離  $\xi_{dd}$  を考える。図 1 の右図に示したように、 $\xi_{dh} < \xi_{dd}$  ならば D-H 対の領域が重ならず、密度揺らぎは  $\xi_{dh}$  の領域内に局所化して絶縁体となる。一方、図 1 の左図のように  $\xi_{dh} > \xi_{dd}$  ならば、D-H 対の領域は相互に重なりダブロンは隣接 D-H 対のホロンと対の相手を変えることによって移動することができ、伝導性が生じる。このように考えるとモット転移点は  $\xi_{dh} = \xi_{dd}$  という条件によって決まるが、図 2 に一例を示したように、計算された全ての場合でそれが成り立つことが示された。この理論は上記の光学格子における量子ガス顕微鏡の実験の進展によって直接確かめ得るものである。

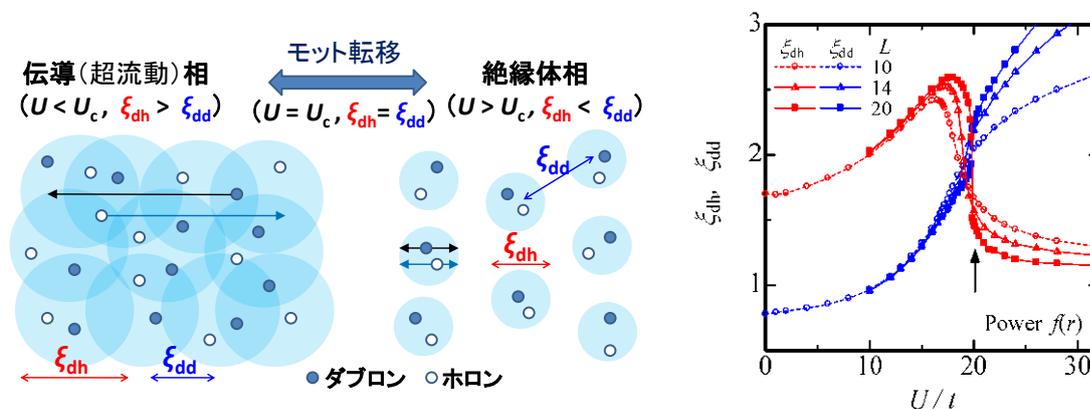


図 1 (左) ダブロン-ホロン束縛によるモット転移描像の模式図。淡色の円が D-H 対の領域を表す。図 2 (右) D-H 束縛長  $\xi_{dh}$  と最低 D-D 間距離  $\xi_{dd}$  の相互作用強度依存性（冪減衰因子）。矢印はモット転移点 ( $L=20$ ) を示し、ここで両者が交差する。 $L$  は系の線形次元。

以上の描像は磁氣的相関を直接導入しない電子系に対しても同様に適用できることが示されている。上で述べた電子系で見出されている非磁性モット転移やドーピングされたモット絶縁体としての銅酸化物超伝導体に対し、上記描像が如何に適用できるか、また磁性との関わりはどうか、今後の研究の展開が期待される。

論文掲載誌 J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) No.8, p. 084607

電子版 <http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/80/084607> (8月10日公開済)

< 情報提供：横山 寿敏（東北大学大学院理学研究科）

宮川 智章（東北大学大学院理学研究科）

小形 正男（東京大学大学院理学系研究科） >