

金属絶縁体転移におけるドルーデの重みと波動関数の位相の役割

物質の電気伝導性（導体か絶縁体か）を測る尺度としてドルーデの重み D は有用である。相互作用強度の変化で起こる金属絶縁体転移（モット転移）も D により調べられるはずだが、多体変分法で通常の試行関数を用いると常に金属という結果となり、長く懸案の問題であった。解析の結果、波動関数に虚部が必要であることが判り、局所電子配置に依存した位相相関因子を導入することにより、 D を適正に計算することに成功した。また、一次摂動論で反強磁性状態の D を調べた結果、バンド絶縁体とモット絶縁体では、絶縁性の由来が定性的に違っていることが示された。

物質の電気伝導性は様々な因子（電子密度、電子間相互作用強度、不純物濃度など）によって大きく変動する。一つのパラメーターを僅かに変えただけで、物質は導体（金属、超伝導体）から絶縁体へと急変（金属絶縁体転移）することがあり、物性科学の重要な研究テーマである。電気伝導性を測る（導体と絶縁体を区別する）「尺度」として重要な物理量がドルーデの重み D である。 D は光学伝導度 $\sigma(\omega)$ の直流 ($\omega=0$) 成分の係数で、 $D=0$ ($D>0$) ならば絶縁体（導体）であることを示す。通常 D は線形応答理論を用いて計算されるが、その際には全固有状態の情報が必要である。コーン仮説（パイエルズ位相 A ）を加えることによる基底状態のエネルギー増分を計算するだけで、同等な量が計算できることを示し、多くの方法で D の計算を容易にした。強相関系を扱う有用な方法である多体変分法でも、この定式化により初めて D の計算が可能になった。

バンドが半分詰まった電子密度の系で、電子間斥力相互作用 U を増大させると、多くの場合、 U が運動エネルギーと拮抗する或る臨界値 U_c でモット転移と呼ばれる金属絶縁体転移を起こし、 $U>U_c$ で系は絶縁体になる。モット転移は 90 年代に動的平均場理論により理解が進んだが、今世紀に入り、多体変分法による研究でも、試行波動関数に（最低限）二重占有数を制御する因子と二重占有-ホール間の束縛因子を導入すれば、（通常一次の）モット転移を適正に記述できることが、 D 以外の様々な物理量（秩序変数である二重占有率など）で確認された。一方、 D については 1991 年に Millis と Coppersmith がこれら二つの因子を導入した波動関数 Ψ_Q をハバード模型に適用した計算を行い、十分大きな U に対しても依然 $D>0$ （導体）であるという結果を得た（図 1 の赤線に相当）。彼らは Ψ_Q は「 $D>0$ の意味で」モット絶縁体を記述できないと結論したのだが、単純に Ψ_Q はモット転移を記述できないと誤解した研究者も多かった。ともあれ、何故この型の試行波動関数が D についてのみ $U>U_c$ でも金属であるという結果を示すのか、長い間謎のままであった。

最近、東北大学理学研究科物理学専攻の研究グループは、 D を正しく計算するには、波動関数に有限の虚部が存在する必要がある（ Ψ_Q は実関数）、モット絶縁体などの強相関領域では局所的電子配置に依存した位相相関因子 P_θ を加えることによって $U>U_c$ では $D=0$ となることを示した。また、 P_θ 無しの時には D が x 軸方向の運動エネルギー $|E_x|$ に一致することも示した。 U_c 値は他の物理量から得られたモット転移点の値と正確に一致した。計算は金属状態と超伝導状態に対して変分モンテカルロ法を用いて行われた（超伝導状態についての結果を図 1 に緑線で示した）。その仕組みを説明しよう。仮想磁場下の電子ホッピングで付加する位相 A を何らかの位相を加えて相殺すると、エネルギーは不変であり、 D はエネルギーの A に関する二階微分であるから、その場合 $D=0$ となる。モット絶縁体ではホッピングが二重占有とホール間に制限されるので、その際に付く A を P_θ によって付加される位相パラメーター θ で相殺できるように、周囲の電子配置を考慮して P_θ の形を決め

ればよい。そうするとモット絶縁体の領域で θ の最適値が $\theta=A$ となり、確かに位相が相殺される。 D 以外の物理量の計算では、 $P_\theta=1$ となって効かないため、これまでの結果は不変である。こうして Millis-Coppersmith 以来の懸案が解決され、 D によるモット転移の記述も $P_\theta\Psi_Q$ により可能になった。一方、超立方格子上の弱相関反強磁性状態のようなスレーター（バンド）絶縁体では、無限小の U (>0) から絶縁体 ($D=0$) でなければならない。 P_θ を反強磁性状態に作用させた波動関数を用いると、 U の大きい場合こそ $D\sim 0$ だが、 $U\rightarrow 0$ では $D\rightarrow |E_x|$ (>0) となってしまう。この理由は一次摂動論で理解される。 $U\rightarrow 0$ では、相関因子部分ではなく、一体（ハートレーフォック）部分に虚部を導入する必要がある。つまりバンド絶縁体とモット絶縁体ではその絶縁性の由来が違っており（波数空間的か実空間的か）、反強磁性絶縁体では U の増大により前者から後者にクロスオーバーすると結論される。これらの成果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の 2015 年 6 月号に掲載された。

ここで導入された局所電子配置に依存する位相因子は、強相関域（特にモットの物理が成り立つ領域）で、カレントを持つ状態を記述する波動関数には必須のようである。例えば銅酸化物超伝導体の擬ギャップ状態の一つの候補である交替磁束状態などには不可欠であることが示されている。また、ここでは最も簡単な形の位相因子のみを議論したが、近年の変分最適化法の急速な発展により、格段に精密な形の位相因子も扱えるようになった。光誘起モット転移を利用した高速スイッチなどへの応用（モットロニクス）も視野に入れると、さらなる研究の進展が望まれる。

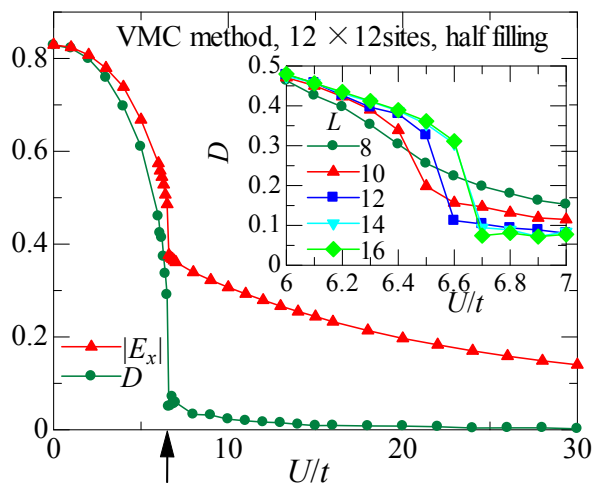


図 1.2 次元ハバード模型に対し、超伝導（非磁性）状態に位相因子 P_θ を導入して計算したドルーデの重み D と x 方向の運動エネルギーの絶対値 $|E_x|$ (P_θ を導入しない場合の D に対応)。矢印で示した U_c/t 値でモット転移が起き、 $U > U_c$ では絶縁体である。挿入図は D のサイズ ($L \times L$) 依存性である。

原論文

[Drude and Superconducting Weights and Mott Transitions in Variation Theory](#)
[Shun Tamura and Hisatoshi Yokoyama: J. Phys. Soc. Jpn. **84** \(2015\) 064707](#)

問合せ先：田村駿（東北大学大学院理学研究科）
 横山寿敏（東北大学大学院理学研究科）