

読者の広場

Q&A

Q: 「モット転移の本質が明らかに」という新聞記事がありました。が、どういう技術により可能になったのでしょうか。また、どういう応用が期待されるのでしょうか？」

A:

ハバードモデルの厳密解と数値計算による解析

金属中の電子が同じ原子内に来たときに互いに反発するとするモデル（ハバードモデル）（図1）を用いて、モット転移の本質を明らかにしました^{1),2)}。具体的には、1次元系では厳密解と動的密度行列繰り込み群法という数値計算法を、2次元系ではクラスター摂動理論という数値計算法を使って、ハバードモデルのスペクトル関数の振る舞いを調べました（図2）。その結果、電子密度を変えたときに、電子の状態が次のように変化することがわかりました。電子密度の低い金属状態では、電子は自由電子として振る舞いますが、電子密度が高くなるにつれて、電子の電荷自由度が徐々に凍結し、モット絶縁体になります。その際、電子のもつスピン自由度は低エネルギーの性質を保ち、モット絶縁体の反強磁性的状態へと連続的に変化します。この特徴は、モット絶縁体のスピンと電荷の分離に起因しており、スピンと電荷の自由度が分離しないバンド絶縁体への転移ではこのようなことは起こりません。

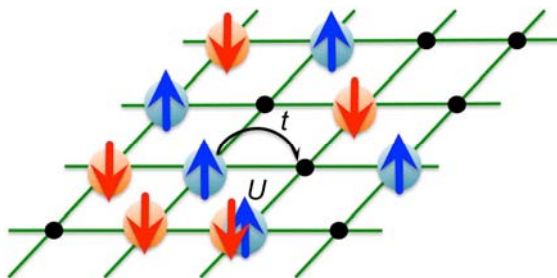


図1. 2次元ハバードモデルの模式図

電子（矢印はスピンを、丸印は電荷を表します）が原子（正方格子上の黒い点は原子の中心を表します）の間を強さ t で飛び移り、1つの原子内に2つの電子が来ると電子間の電氣的反発力によってエネルギーが U だけ上昇する様子を表しています。

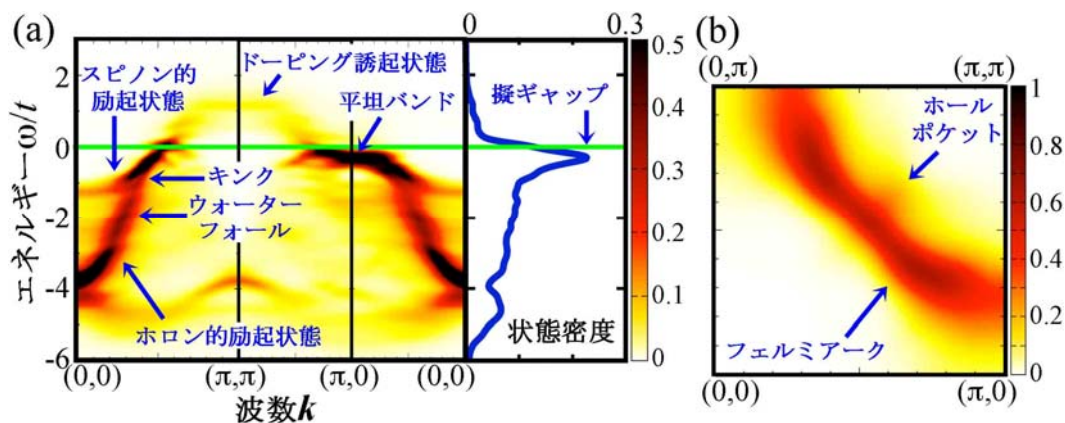


図2. 2次元ハバードモデルのモット転移近傍でのスペクトル関数の強度分布

(a) 左パネルは波数 k 、エネルギー ω でのスペクトル強度分布を、右パネルは状態密度（波数 k について積分したもの）を示しています。縦軸は、化学ポテンシャルを基準として、エネルギーを電子の飛び移りの強さ t を単位として表しています。各波数 k でスペクトル強度が幅広いエネルギー領域に分布していることは、電子を自由電子のように見なす描像が妥当ではなくなっていることを意味しています。(b) $\omega \approx 0$ での強度分布を示しています。

高温超電導体との関係

銅酸化物高温超電導体は、モット絶縁体にホール（または電子）をドーピングすることによって得られ、超電導相の周辺では様々な異常な振る舞いが観測されています。そのため、高温超電導はモット転移近傍の異常な電子状態と関係しているのではないかと考えられています。今回の研究によって、電子間反発力を取り入れた最も単純なモデルである 2 次元ハバードモデルによって、高温超電導体で観測されていた様々な異常な振る舞いを統一的に説明することができました (図 2) ¹⁾。これまで異常と思われてきた振る舞いは、モット転移近傍でスピンと電荷の自由度が分離する兆候として現れる 2 次元強相関電子系の性質であることがわかりました。

応用について

環境・エネルギー問題の解決のために、より高い温度で超電導を示す材料の開発が望まれています。そのためには高温超電導のメカニズムを解明し、新しい高温超電導体の設計指針を確立することが重要となります。今回の研究では高温超電導のメカニズム解明には至りませんでした。高温超電導の研究において最も問題となっていた様々な異常な振る舞いを統一的に理解できるようになりました。これにより、今後の高温超電導研究の展望が開け、高温超電導のメカニズム解明に向けて大きく前進するものと期待されます。

参考文献：

1. Masanori Kohno, "Mott Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model," Physical Review Letters 108, 076401 (2012).
2. Masanori Kohno, "Spectral Properties near the Mott Transition in the One-Dimensional Hubbard Model," Physical Review Letters 105, 106402 (2010).

回答者：独立行政法人 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点
ナノシステム構築グループ：河野昌仙 様

[超電導 Web21 トップページ](#)

「Web21 についてのご意見・ご感想、「読者の広場」その他で取り上げて欲しい事項、その他のお問い合わせは、超電導 Web21 編集局メール web21@istec.or.jp までお願いします。」