

概要

強相関電子系が示す金属絶縁体転移において、電子がもつスピンや軌道といった内部自由度がもたらす影響は長年注目を集め、実験・理論ともに精力的に研究されてきた。しかし、こうした多自由度系に対する理論的研究では、自由度の多さによって生じる計算コストの高さが系統的な解析を困難にしているため、多彩な側面を見せる金属絶縁体転移の包括的な理解は得られていないのが現状である。本論文の目的は、多くの自由度を比較的容易に取り扱うことのできる解析手法の一つである回転不変スレーブボソン近似を用いて、こうした多自由度系が示す金属絶縁体転移を系統的に調べることである。様々なパラメタを変化させた計算を行い、先行研究との比較を通じて、この計算手法の有効性を調べ上げた。まず、2軌道および3軌道をもつ多軌道ハバードモデルについて、いくつかのコメンシュレートなフィリングに対する解析を行った。その結果、フント結合と結晶場分裂が系に与える影響は軌道の数とフィリングによって大きく異なることがわかった。また、フント結合と結晶場分裂を変化させることで、単純なモット絶縁体相だけでなく、部分的に軌道偏極した絶縁体相、軌道選択モット相、完全軌道偏極した金属や絶縁体相などといった多彩な相へ転移するという結果を得た。これらの得られた結果の多くは、動的平均場理論等の先行研究を良く再現しており、回転不変スレーブボソン近似が多軌道系への計算に有効であることを示している。しかし、転移の次数や絶縁体相における性質のいくつかについて異なる結果が得られた。また、サイト間のダイマー自由度を持つダイマーハバードモデルに対する解析も行った。その結果として、電子がダイマーを組むことでモット絶縁体状態になるダイマーモット転移が起きるためには、クーロン相互作用とダイマーパラメタの両方が大きいか、またはサイト間クーロン斥力が必要であるという結果が得られた。これは、ダイマーに働く有効的なクーロン相互作用の見積もりから得られる結果とコンシステントであることがわかった。以上より、金属絶縁体転移を示す多自由度系に対して、回転不変スレーブボソン近似は多自由度系に対して簡便ながらも実用性の高い手法であることが結論づけられた。