

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 大塚雄一

電子間のクーロン相互作用に起因する電子相関は磁性、電荷秩序、超伝導等、多様な電子物性に大きな影響を与えうる要因として近年多くの興味を集めている。一方でこの電子相関は多体問題の本質であり、理論的取り扱いには多くの問題を含み解析的手法による研究は限られたものとならざるを得ない。対して数値的手法は解析的手法と相補的側面を持ち扱いうる系の大きさ等いくつかの強い制限はあるものの電子相関の強い系においては極めて有効な研究手法となっている。特に格子上のモデルは、数値的に取り扱いやすいため精密な解析が可能であり、有力な研究対象である。本論文は、これらの背景の下、原理的に近似を含まない数値手法である有限温度量子モンテカルロ法を用いて電子相関のある格子上の電子系に対し研究を行ったものである。

第1章「序」では、本論文の背景、目的、構成について述べられている。

第2章「ハバードモデル」では、本論文における議論において本質的であるハバードモデルの関連する部分に対してその基本的性質をまとめている。

第3章、第4章、第5章が本論文の中心であり、各主題についての動機付けから具体的にを行った数値的研究並びに対応する考察が述べられている。

第3章「相互作用と乱れの競合効果」では、ハバードモデルにランダムなポテンシャルの項を加えたアンダーソン・ハバードモデルに対してグランドカノニカル分布における有限温度の量子モンテカルロ計算を行った結果を議論している。具体的にはハーフフィリングにおいて1次元から3次元までの乱れと電子相関の共存する系を系統的に取り扱った。特に電荷圧縮率とスピン構造因子に着目し、モットギャップの崩壊について議論し有限の乱れの大きさによって初めてモットギャップが崩壊することを数値的に示した。さらにこのモットギャップの崩壊した相においてはモット絶縁体に特徴的な強い反強磁性秩序が消失していることを数値的に確認した。

第4章「特異な状態密度を持つ系でのモット転移」においてはバンド構造に起因する状態密度の特異性が電子相関並びにモット転移、スピン秩序形成に大きな影響を与え得る可能性に着目し、特に状態密度がフェルミエネルギー近傍で線形に消失するモデルとしてフラックス相を取り上げ、そこでのモット転移に関して数値的に研究を行った結果を述べている。歴史的にはフラックス相はいくつかの強相関電子系における平均場として提出されたが、

他にもグラファイトシート等の物理的に重要な系をここでの議論は包括しうることを留意しておく。このフラックス相においてはその特異な低エネルギー励起構造のため弱結合理論においては磁気秩序の存在は期待されないが、一方で強結合領域は通常のハバード模型と同様に実効的に反強磁性のスピンのハミルトニアンにより記述されると考えられ長距離秩序の存在の可能性がある。よって有限の強度におけるモット転移が期待されるが、実際本章の研究による量子モンテカルロ計算によってこの事実が数値的に確認された。本章では、これらの結果を通常のハバード模型では無限小の相互作用の強さでモット転移が起こることと対照しながら議論している。

第5章「相関効果によるフェルミ面の異方性」においては電子間の相互作用が電子系の低エネルギー励起に強い運動量依存性を与える可能性に着目した研究について述べている。具体的には近年フェルミ面上の異方的性質の存在の可能性が実験理論の両面から示唆されていることを背景とし、ハバード模型において運動量分解した電荷圧縮率を数値的に検討している。特にその温度依存性に着目し、ハーフフィールドにおいて反強磁性の実効的交換相互作用程度の温度領域においては強い運動量依存性が存在することを見いだした。数値的には微分量に関する表式を解析的に取り扱うことによりすべての計算をいわゆる負符号の問題のないハーフフィールドの条件下で行い、そこから無限小のドーピング依存性とでもいべき量に関して具体的な情報を取りだした点にその理論的意義がある。さらにより詳細な検討によりこの強い運動量依存性は相互作用強度と同程度の温度領域においては消失することを示した。またこの運動量依存性の相互作用依存性並びにドーピング依存性についても数値的に詳しく検討を加え、この強い運動量依存性はいわゆるオーバードーピング領域においては消失することも示した。

最後に第6章「研究のまとめ」では、本論文における研究の概要がまとめられている。

以上を要約するに、本研究は電子相関並びに乱れの効果に起因する興味深い現象に対して数値的手法により詳しい検討を加え、多くの新しい知見を見出しており、物理工学並びに物性物理学の発展に寄与するところが極めて大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。