

論文審査の結果の要旨

氏名 酒井 志朗

遷移金属酸化物では幅の狭い d 電子軌道由来のバンドが極めて重要な役割を果たすことがよく知られている。 d 電子間のクーロン相互作用の影響により、これらの物質群では多彩な現象が生じる。このとき電子間のクーロン相互作用だけでなく d 電子の軌道自由度も物性に大きく影響していると一般に考えられているが、 d 電子の軌道自由度まで取り込んだ理論計算は困難であり現在も残された重要な問題となっている。修士（理学）酒井志朗提出の学位請求論文では、この問題に動的平均場近似の手法を用いた数値計算によるアプローチが試みられた。この近似計算の範囲で、新しい数値計算手法開発が行われ、現実の物質群に対応する数値計算が行われた結果、以下で述べるいくつかの重要な知見が得られた。

本論文は英文で7章からなる。まず第1章では強相関電子系の諸現象が紹介された後、軌道自由度が重要となるその典型物質としてルテニウム酸化物が取り上げられ、実験結果が詳しく述べられた。引き続き第2章では軌道電子間に働く有効ハミルトニアン H_{eff} の導出が行われた。電子スピンのSU(2)対称性を正しく再現するためには、フント結合項のうちイジング項と呼ばれる対角項と、スピントリップやペアホッピングを表す非対角項の両方を取り入れる必要があることが強調された。第3章では強相関電子系を取り扱う理論手法として、動的平均場理論の解説が行われた。

第4章では、多軌道ハバード模型に対する動的平均場計算の有力な手法として、新しいモンテカルロ法が導入された。まず模型のフント項の部分について形式的に級数展開を行い、ハミルトニアン H_{eff} の項同士の非可換性を取り除いた上で、フント結合項と電子間相互作用項にストラトノビッチ-ハバード変換を施して2つの補助場が導入された。級数部分は級数展開モンテカルロ法、補助場に対しては補助場モンテカルロ法を用いることで、効率のよいモンテカルロサンプリングが得られることが明らかにされた。この新しい方法では、通常のモンテカルロ法では到達できない低温領域の計算が可能となる点が注目される。

第5章では前章で導入したモンテカルロ手法を用いて、二軌道ハバード模型の動的平均場による解析が行われた。本論文では(1)格子構造および(2)フント結合の強さの視点からこの模型を調べることで、強磁性状態が実現されるために必要とされる条件が議論された。(1)の格子構造については、特に低電子密度領域での近似計算によって、フェルミ面近くの状態密度の増大が強磁性の安定化に寄与する、という主張が行われてきた。一方、(2)のフント結合由来の強磁性についても、主に動的平均場近似による研究が行われ、広いパラメータ領域で強磁性が安定化することがすでに議論されている。本論文では、フィリングが0.75から1.5の比較的高電子密度領域で、上記の二つの条件のいずれかが欠けても強磁性状態が安定化されないことを初めて見いだした。同

時に強磁性状態はフント結合の対角項と非対角項の間の微妙なエネルギーバランスの上に成り立っていることを初めて明らかにした。これらの知見は、Niなどの現実の強磁性物質を理解する上で大変有用であり、興味深い。またバンド計算と併用した今後の理論展開も期待させる。

第6章では Sr_2RuO_4 に対する密度汎関数法(LDA法)によるバンド計算に動的平均場近似を取り込む研究が行われた。まずLDA計算から t_{2g} 軌道起源の3つのバンド構造を抜き出して、二次元の有効モデルを構成した。本論文では相互作用をパラメータとし、電子間クーロン相互作用とフント結合の強さを変えていきながら動的平均場近似の計算を行った結果、LDA計算のみを行った場合と大きく異なる状態密度が得られた。この計算結果は、少なくとも定性的には実験結果をよく説明する。またSU(2)対称性を保つモデルでは、すべての軌道で近藤共鳴ピークが発達しやすいことも明らかにされた。この計算はSU(2)対称性を保持したまま軌道自由度をLDA+動的平均場で行った初めての計算例となっており、貴重な結果と判断される。

以上、各章の紹介と共に本論文で得られた物理学上の知見を解説した。本論文は多軌道ハバードモデルを中心として数値計算の改良と物質群を想定した応用計算とが有機的に連携した仕事となっており、基礎物理学への十分な貢献が認められる。従って審査員全員が学位論文として十分なレベルにあり、博士(理学)の学位を授与できると判断した。なお、本論文の大部分はPhysical Review B誌とPhysica B誌などに青木秀夫氏・有田亮太郎氏・Kersten Held氏らとの共著としてすでに出版が行われている。これらの論文では、第一著者である論文提出者が主体となって計算および結果の解釈を行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断される。またこの件に関して、青木氏、有田氏、Held氏の同意承諾書が提出されている。