論文内容の要旨

論文題目　Functional renormalization group method beyond the static approximation and its application to 2D Hubbard model.

(静的近似を超えた汎関数くりこみ群法と2次元ハバード模型への応用)

氏名　高島　宏和

序論

汎関数くりこみ群(fRG)は、場の量子論の手法を援用することにより、ダイヤグラムを系統的にとりいれながら、強相関電子系の感受率や相関関数を計算できる強力な手法として知られている。具体的には、グリーン関数の母関数の定義式を用意し、その両辺を流れのパラメータで微分して得られる微分方程式、すなわちくりこみ群の方程式を、裸の相互作用の極限から積分することにより、強相関領域における感受率を計算する。従来の方法においては専ら、静的近似が用いられ、すなわち繰り込み群方程式における四点関数の松原周波数依存性が無視されてきたため、自己エネルギーの繰り込み群の方程式の中にある四点関数の松原周波数依存性が無視されてしまい、単純には自己エネルギーのω依存性が計算できなくなってしまっていた。このため自己エネルギーの計算には不完全な方法を用いるしかなく、例えばモット転移などの系において計算が破綻する。本論分は、この点を克服する方法論を提案する。

まずその前段階として、本論文においては、静的近似の範囲内で、汎関数繰り込み群における高速アルゴリズムを提案する。この理由は、単に計算時間の問題で静的近似という枠組みの範囲内という前段階での計算時間を減少させる必要があるだけではなく、そもそも静的近似の範囲内で、四点関数の運動量依存性を正しく求めておく必要

がある。数値計算を行うためには、四点関数を波数空間上で分割する必要があるが、一般のバンド分散・フェルミ面に対して、あるいは波数依存性のある相互作用に対しては、四点関数を、直交座標で等間隔に分割するのが普遍性が高い。しかし、これには、計算時間が膨大となるため、従来は四点関数の各波数において、2 次元の波数空間上で、四点関数の動径方向の波数依存性を無視し、偏角方向の波数依存性のみをとりいれるという角度分割形四点関数が広く用いられてきた。我々は、より望ましい直交座標で分割した四点関数を用いて、角度分割形四点関数を単純に用いる方法よりも、大幅に計算時間を短縮するアルゴリズムを発見した。我々のアルゴリズムにより、運動量依存性のある相互作用を正確にかつ高速にとりいれることができるようになり、また従来の角度分割法によるフェルミ面の分割ができないような一般のフェルミ面に関しても取り扱えるようになった。我々の結果は、素朴な方法に比べて、典型的には 10^2 から 10^3 分の 1 の計算量で計算できる。

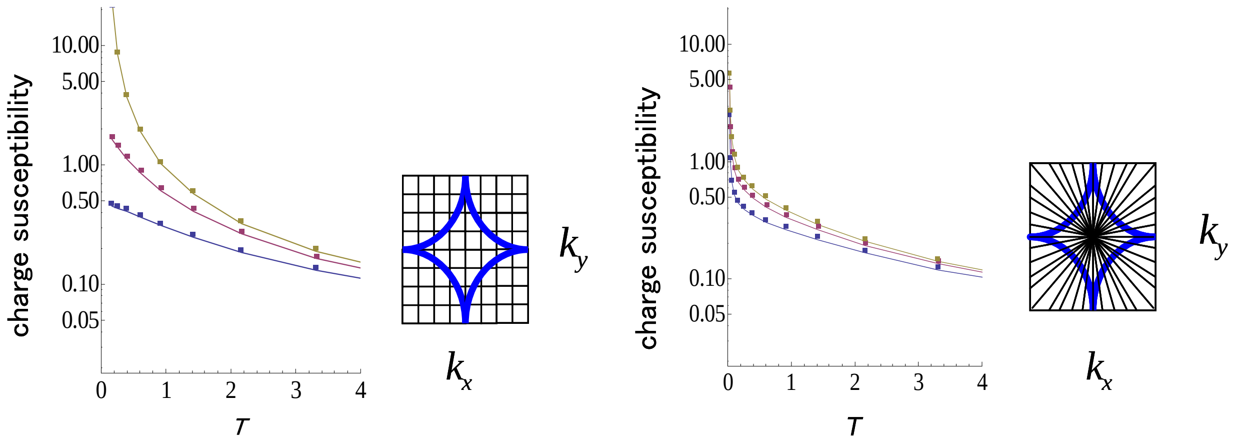
　この準備の下で、静的近似を超えた汎関数繰り込み群の方法論を提案する。最大の問題点は、頂点関数の松原周波数における分割をどのように扱うかということである。単純には、松原周波数は数百から数千ほど必要になるので、四点関数の場合、静的近似に比べ単純計算で 10^9 から 10^{12} 倍の計算量が必要となり、事実上計算困難である。そこで我々は、自己エネルギー、三点バーテックス、四点関数のそれぞれの繰り込み群方程式の中に入ってくるプロパゲータの松原周波数空間での漸近形について考察し、バーテックスの松原周波数空間に関する分割を工夫し、少ない松原周波数空間における分割数で繰り込み群方程式を効率よく積分する方法を提案する。また、いくつかのテスト計算を行い、方法論の有効性を確かめた。

本論文においては、第一章で研究の背景について説明したのち、第二章で汎関数くりこみ法について解説した。第三章で、我々の開発した静的近似の範囲における汎関数くりこみ群の高速アルゴリズムについて述べ、いくつかのテスト計算を行い、方法論の有効性について議論した。第四章では、静的近似を超えた汎関数繰り込み群の数値計算を行う方法論を提案し、テスト計算を通じて方法論の有効性を確認した。第五章において、全体をまとめるとともに、今後の課題について議論した。

静的近似の範囲内における、汎関数繰り込み群法の高速アルゴリズムの開発

　序論で述べた動機に基づき、静的近似の範囲内において、四点関数の運動量依存性を正確にかつ高速にとりいれるためのアルゴリズムの開発を行った。まずはじめに、我々は、繰り込み群の方程式における、プロパゲーターとバーテックス関数の振る舞いについてコ

メントし、四点関数の繰り込みを行わず三点バーテックスの繰り込みのみを行ったときなど、極限的な状況の解の振る舞いを説明した。次に、プロパゲーターとバーテックス関数の波数依存性が、互いに大きく異なることを利用し、2 種類の波数空間メッシュを導入することができることを示した。このことと、繰り込み群の方程式のもつ対称性を利用すると、高速アルゴリズムが可能になることを示し、その具体的な表式を与えた。次に、
さまざまなテスト計算を行い、方法論の有効性について議論した。t-t' ハバード模型では、角度分割法四点関数を用いた従来法と、直交座標分割法による四点関数を用いた本アルゴリズムを用いた方法が、整合する結果を与えた。従来の角度分割法四点関数では、四点関数の角度方向の依存性は正しくとらえているものの、動径方向の依存性は正しくとらえていないにもかかわらず定性的に正しい感受率が得られる場合があるが、この理由は単に、このような場合では、三点関数の繰り込みが感受率に支配的な寄与をし、四点関数の繰り込みの感受率への効果は二次的なものであることが原因である。次に、ハーフフィリングにおける量子モンテカルロ法で得られた感受率を比較した結果、T>0.5t 程度で量子モンテカルロと同一の結果が得られた。低温においては、自己エネルギーを無視している静的近似の影響が大きく現れた。次に、出発点の相互作用に k 依存性をもつ拡張ハバード模型の例について考察し、相互作用が運動量依存性がある場合には、角度分解法の分割法より、直交座標分割法における分割が、期待通りすぐれていることがわかった。

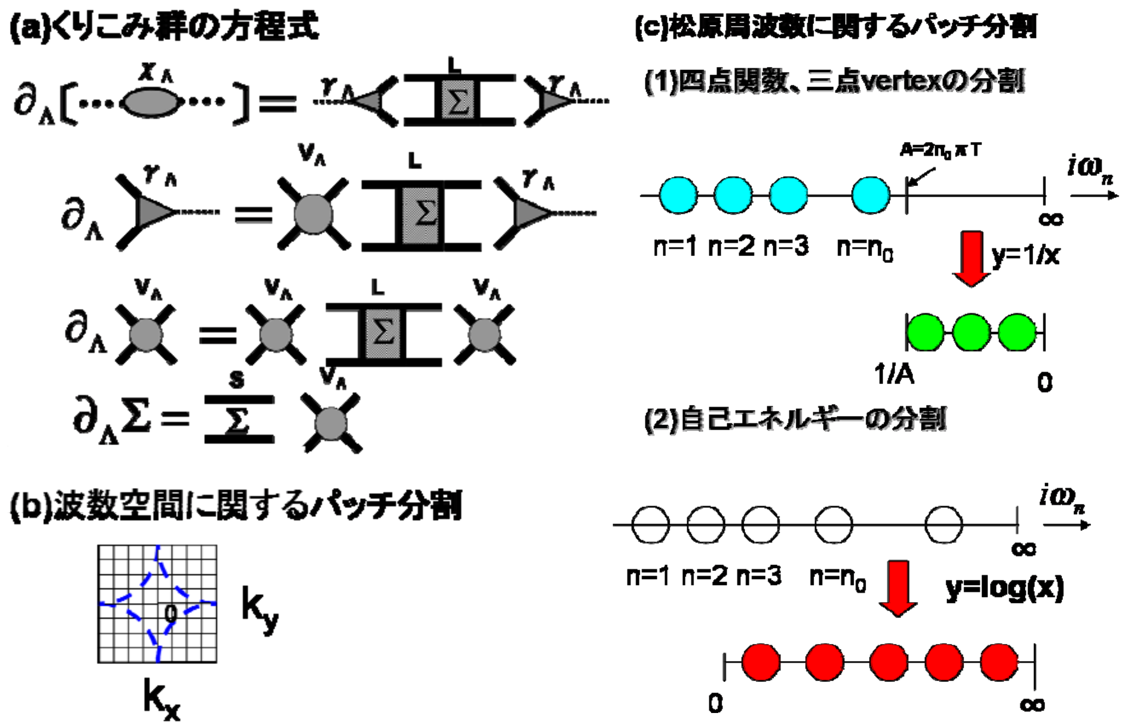


U=4,n=1 において、オフサイト斥力 V を変化させた[V=0.5(○),V=1(▲),V=1.25(●)]
拡張ハバード模型における電荷感受率の温度依存性を,直交分割法（左）と角度分割法（右）の両方で計算したもの。左の結果が量子モンテカルロなどと一致し正しい結果を与える。

静的近似を超えた汎関数繰り込み群法の開発

以上の高速化のもとに、バーテックス関数の松原周波数依存性を考慮した計算を

行うための方法論を提案する。これにより、強相関電子系において重要な自己エネルギーの効果を、正確に議論することが可能になる。まずはじめに、繰り込み群の方程式(図(a))におけるバーテックス関数の松原周波数空間における振る舞いに着目することにより、プロパゲータの松原周波数空間における漸近的挙動に合致した離散化が適することの重要性を指摘した。
これに基づき、バーテックス関数に関して、波数空間においては直交メッシュによるk 空間離散化（図(b)）を行い、前述の我々の高速アルゴリズムを用いる一方、松原周波数空間においては、プロパゲーターの漸近的なふるまいを考慮した分割（図(c)）を行う、という方法論を提案し、その具体的な形を与えた。
　この方法の有効性を、いくつかのテスト計算をおこなうことにより確認した。



結論と今後の課題

　我々は、重要な問題と認識されてきたが、計算時間の点で技術的な困難があった静的近似を超えた汎関数繰り込み群の方法論を、初めて提案し、その有効性を議論した。
　具体的な問題への応用により、強相関電子系の物理に対する、新しい展望が期待できる。
　また、今後の課題として、高次のループをとりこんだ方法論の可能性についても議論した。