

論文審査の結果の要旨

氏名 高島宏和

本論文は 5 章からなる。第 1 章では研究の背景が述べられている。第 2 章では、汎関数くりこみ法についての解説である。第 3 章では静的近似の範囲内で汎関数くりこみ群法に対して高島氏らが開発した高速化アルゴリズムとその有効性の検証が述べられている。第 4 章では静的近似を超えた汎関数くりこみ群法に対する数値的手法について述べられている。5 章では結論と将来の展望が述べられている。

本論文の研究対象は強相関電子系であり、強相関電子系を記述するハバード模型に対する理論的手法の一つである「汎関数くりこみ群法」に関するものである。ハバード模型は、モット転移を記述しうる標準的な電子模型であり、また強相関電子系における超伝導発現機構の解明のために、その基底状態や有限温度の相図の理解が欠かせない重要な模型である。特に 2 次元ハバード模型は、銅酸化物超伝導体との関連から精力的に研究されている。2 次元ハバード模型に対する数値的手法として、汎関数くりこみ群法のほかにも数値的厳密対角化法、量子モンテカルロ法、経路積分くりこみ群法などがある。熱力学的極限における自己エネルギー、スペクトル関数などの動力的物理量を、運動量依存性まで含めて計算するのは、汎関数くりこみ群法以外の手法では困難である。

汎関数くりこみ群法は、場の量子論の手法を援用し、ダイアグラムを系統的に取り入れながら、強相関電子系の感受率や相関関数の計算する理論的手法である。具体的には、グリーン関数の母関数の定義式を用意し、その両辺の流れのパラメーターで微分して得られる微分方程式（くりこみ群方程式）を、裸の相互作用の極限から積分することで強相関領域における感受率、相関関数を計算するのがこの方法の主な手順である。

汎関数くりこみ群法を用いた、その先行研究においては主に二つの近似が用いられている。一つは静的近似と呼ばれるものであり、四点関数の松原周波数依存性を無視するものである。もう一つは、四点関数の変数である運動量の空間を、フェルミ面に沿った角度方向に離散化し、フェルミ面に垂直な動径方向の依存性を無視する近似である。高島氏は二番目の近似が必ずしも正当化されないことを指摘し、実際 2 次元拡張ハバード模型のハーフフィリングにおける電荷感受率の温度依存性が量子モンテカルロ法の結果と一致しないことを見出した。そこで運動量空間を直交座標で分割し、より正確に四点関数の運動量依存性を取り扱う手法において計算時間を短縮するアルゴリズムを開発した。その手法によって得られたハーフフィリングにおける電荷感受率は、2 次元ハバード模型でも、拡張 2 次元ハバード模型でも、量子モンテカルロ法の結果と一致していることが確かめられており、これにより汎関数くりこみ群法において静的近似が成り立つ場合には、四点関数の運動量空間依存性を正確に取り入れ、かつ実行可能な計算手法が得られたことになる。これが 3 章の内容である。

この成果を背景に、高島氏は静的近似を超えた汎関数くりこみ群法のアルゴリズムを提案した。四点関数の松原周波数についての和をより正確に扱うために、その高周波領

域での漸近的挙動に合致した周波数空間の離散化を導入し、運動量依存性の取り扱いは 3 章のアルゴリズムを用いることで、ハバード模型で反強磁性帯磁率、強磁性帯磁率、超伝導帯磁率の温度依存性を計算した。またハーフフィリングのハバード模型において自己エネルギーの周波数依存性を計算した。この結果は、静的近似を超えた汎関数くりこみ群法における初めての計算例である。結果の妥当性は、Flex と呼ばれる別の手法による計算結果と高周波領域でほぼ一致することにより、確認している。これが 4 章の内容である。

本研究の成果は 3 章については *Low Temperature Physics 25* の会議録として *Journal of Physics ;Conference Series* に掲載が決まっており、3 章、4 章の成果については他 2 篇の原著論文として発表予定である。

なお、本論文で述べられている結果は、青木秀夫氏、黒木和彦氏、有田亮太郎氏との共同研究の成果である。しかし論文提出者が主体となって分析および検証を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。