

論文内容要旨（和文）

平成 22 年度入学 大学院博士後期課程

地球共生圏科学専攻 物理学 分野

氏 名 渡辺 秀治



論 文 題 目 共鳴Hartree-Fock法を用いた2次元ハバードモデルの量子揺らぎの研究

1986年にK. A. MüllerとJ. G. Bednorzによって、銅酸化物高温超伝導体が発見されてから26年が経過しているが、その発現機構は未だ解決されていない。発現機構解明は、工業技術への応用という点において、より転移温度の高い物質を探求するために重要な課題である。また学術的な点では、電子間相互作用の記述法の確立という理論的問題を含んでおり、物性物理にとどまらず、量子化学、原子核物理においても重要な課題である。

電子間相互作用の効果があまり大きくなない場合、平均場近似という手法を用いることが出来る。平均場近似において、ある電子に注目すると、他の電子からの相互作用(電子間相互作用)は有効ポテンシャルに繰り込まれる。この有効ポテンシャル中を電子が運動すると考え、計算を行う。非常に荒い近似のようであるが、導体や半導体、そして絶縁体(バンド絶縁体)の分類に成功している。また強磁性状態や反強磁性状態などの磁性状態や、金属の示す超伝導など、多くの物性を説明することもできる。

その一方で、平均場近似により得られた電子状態が実際のものとは全く異なる場合がある。その有名な例が、銅酸化物高温超伝導体である。銅酸化物高温超伝導体を平均場の範囲で考察すると、伝導バンドが半分だけ占有されているため、金属に分類される。しかし、実際は絶縁体である。この違いは、平均場近似で無視された電子間相互作用によって、電子の運動が抑制されたために生じる。このような絶縁体はモット絶縁体と呼ばれている。平均場近似を行うことで無視された電子間相互作用は電子相関と呼ばれており、電子相関が大きな系は強相関電子系と呼ばれている。銅酸化物高温超伝導は、モット絶縁体にホールをドープすることで発現することから、その発現機構の解明には、強相関電子系の理解が必要である。

電子間相互作用が働く複雑な多体系を研究する上で、計算科学的な手法は強力な道具となる。事実、金属-絶縁体相転移近傍の振る舞いや超伝導ギャップの対称性など、銅酸化物高温超伝導の研究において非常に有益な情報を与えている。

このような成功の一方で、従来の計算手法には、決定的に欠けている点がある。それは、従来の手法では、取り込まれた電子相関効果の背景にある物理的描像が見えにくいということである。本研究では量子揺らぎの可視化を行い、“計算から得られた物理量の背景にある物理”という重要なテーマに取り組む。

銅酸化物高温超伝導に対する有効模型の一つとして、2次元正方格子ハバードモデルがある。このモデルは、電子のホッピングと同一格子点上に来た際に働くクーロン相互作用(オンサイトクーロン相互作用)で構成される、シンプルなモデルである。しかし、そのシンプルさと裏腹に、量子揺らぎという壁があるために、平均場を越えた電子状態の様子は、未だ明らかにされていない。

本研究では、共鳴Hartree-Fock法という計算科学的手法を用いた。この手法では、多体系の状態を非直交なスレーター行列式の重ね合わせで近似する。重ね合わせの係数と各スレーター行列式の軌道は、系のエネルギーを最小にするように

最適化される。この手法を用いた理由は、電子相関を取り込んだ、比較的大きな2次元系の計算が可能であることに加え、最適化後のスレーター行列式の構造を解析することにより、量子揺らぎを可視化できるからである。可視化された揺らぎと、得られた物理量を比較することで、得られた物理量の背後にある物理的描像を明らかにすることが出来る。

本研究により、2次元ハバードモデルにおける量子揺らぎの詳細が明らかとなつた。

1/2フィリング系の量子揺らぎは、スピノン-反スピノン対の運動によって記述できることがわかった。ここで、スピノンとは、SDWの位相を反転させる欠陥である。

数%から20%程度ホールドープした系の量子揺らぎが、ポーラロンの運動によって記述できることがわかった。ここで、ポーラロンとは、SWDとCDWを結ぶ位相欠陥であり、電荷と спинを持つ。ポーラロン間相互作用について考察した所、電子相間に起因した引力が働くことを明らかとなつた。

さらに、この領域におけるフェルミ面の形状を、運動量分布の傾きから見積もった結果、アーク状のフェルミ面（フェルミアーク）が得られた。この結果は、光電子分光実験による結果を良く再現している。フェルミアークが得られるドーピング領域の量子揺らぎが、ポーラロンによって記述できることから、フェルミアークがポーラロンによって形成されていると考えられる。

一方で、40%程度のドーピングでは、通常の金属的振る舞いをすることがわかった。

本研究で得られた結果は、ポーラロンが高温超伝導におけるキャリアーとなることを強く示唆している。

以上をまとめて学位論文とする。

学位論文の審査及び最終試験の結果の要旨

平成25年 2月18日

理 工 学 研 究 科 長 殿

課程博士論文審査委員会

主査 富田 壽一

副査 遠藤 龍介

副査 大西 彰正

副査 田村 肇

副査

副査

学位論文の審査及び最終試験の結果を下記のとおり報告します。

記

1. 論文申請者

専攻名 地球共生圏科学専攻
氏名 渡辺秀治

2. 論文題目（外国語の場合は、その和訳を併記する。）

共鳴 Hartree-Fock 法を用いた 2 次元ハバードモデルの量子揺らぎの研究

3. 審査年月日

論文審査 平成25年 1月23日～平成25年 2月18日
論文公聴会 平成25年 2月18日
場所 理学部1号館13番教室
最終試験 平成25年 2月18日

4. 学位論文の審査及び最終試験の結果（「合格」・「不合格」で記入する。）

(1) 学位論文審査 合格
(2) 最終試験 合格

5. 学位論文の審査結果の要旨 (1,200 字程度)

別紙のとおり

6. 最終試験の結果の要旨

別紙のとおり

別 紙

専攻名	地球共生圈科学専攻	氏名	渡辺 秀治
学位論文の審査結果の要旨			
<p>本論文は、ホールドープした2次元ハーバードモデルにおける量子揺らぎを可視化することで、</p> <ul style="list-style-type: none">1) 電子相関に対する物理的描像を視覚的に理解すること、2) 銅酸化物高温超伝導のキャリアーを明らかにすること、3) キャリアーの様子と実験結果との対応関係を明らかにすること <p>を目的としている。</p>			
(第1章) 本研究の対象物質である銅酸化物高温超伝導体の性質や未解決問題、従来の計算科学的手法のもつ問題等を端的にまとめた後、本研究で明らかにしたことがまとめられている。			
(第2章) 金属の示す超伝導の発現機構の概略と、銅酸化物高温超伝導体の基本的な性質や未解決問題についてまとめられている。その中で、スピニギャップやフェルミアーク、ストライプといった、銅酸化物高温超伝導で見られる特異な現象について言及している。			
(第3章) 本研究で用いたハーバードモデルについての説明、および、ハーバードモデルを用いた先攻研究や、その問題点について言及し、本研究の目的を述べている。その後、本研究で用いた3つの計算手法、Hartree-Fock (HF)、共鳴 HF 法、射影 HF 法について説明、および軌道最適化の方法である Direct optimization についての説明がなされている。最後に、共鳴 HF 法と変分モンテカルロ法とを比較し、共鳴 HF 法の計算精度高さを示した。			
(第4章) 共鳴 HF 法を用いた計算結果がまとめられており、次隣接格子点間トランスファーの導入やホールドープ量の増加により、系の揺らぎが変化する様子を視覚的に示した。広範囲なドープ領域において、ドープしたホールがポーラロンと呼ばれる位相欠陥を形成すること、取り込まれた電子相関がポーラロンの運動に起因することを示した。ポーラロン間に、電子相間に起因した引力が働くことを示し、ポーラロンが高温超伝導におけるキャリアーとなりうることを示した。運動量分布の勾配からフェルミ面の構造を見積もり、ポーラロンがフェルミアークと呼ばれる不完全なフェルミ面を形成することを示した。これにより、ポーラロンとフェルミアークの関係性を示した。			
(第5章) 全体のまとめと考察が記述されている。			
<p>本論文は、申請者を第1著者とする英文論文として、Journal of the Physical Society of Japan に掲載されることが決まっている。(掲載期日は未定)</p>			
審査員全員一致で、本論文が博士学位論文に値すると判断し、合格と判定する			
最終試験の結果の要旨			
学位論文を中心とし、銅酸化物高温超伝導体や量子多体系論についても口頭発表を行い、研究の質とプレゼンテーション能力を審査した。また、審査員を中心とした公聴会出席者からの質問、意見に対して適切な返答ができるか、研究に対して深いレベルで理解できているかどうかを審査した。渡辺君の研究は、世界的な物性物理学の研究水準にあり、プレゼンテーション能力の高さも示した。また、質疑応答を通して理解力の深さも博士の学位を附するに十分なものであると判断した。			
これらの点から、審査委員全員一致で合格と判断した。			