



Title	Many-variable variational Monte-Carlo study of unconventional superconductivity in multiband systems
Author(s)	加藤, 大智
Citation	大阪大学, 2020, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/76366
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

論文内容の要旨

氏 名 （ 加 藤 大 智 ）

論文題名

Many-variable variational Monte-Carlo study of unconventional superconductivity in multiband systems
(多変数変分モンテカルロ法による多バンド系における非従来型超伝導の研究)

論文内容の要旨

近年、鉄系超伝導に関する研究などから、多バンド系の超伝導において、フェルミ面を形成せず、フェルミ準位近傍に存在する「incipientバンド」の重要性が指摘されている。多バンド系の先行理論研究として弱結合の摂動論があるが、そこでの描像が強結合領域でも成り立つとは限らない。そこで我々は、強相関高精度手法である多変数変分モンテカルロ (mVMC) 法を様々な二バンド系に適用した。

mVMCとは多数の変分パラメータを持つ試行波動関数を仮定し、エネルギーが最小となるようにそれらのパラメータを最適化する手法である。変分モンテカルロ法 (VMC) のバイアスは変分パラメータの数に依存する。従来のVMCでは変分パラメータの数が高々数十個であるのに対して、mVMCでは数千もの変分パラメータを用いることによって、様々な量子揺らぎや強相関効果を高精度に記述できる。mVMCはアルゴリズムが複雑であり、その取り扱いも難しいが、筆者は先行研究を参考にしながらmVMCを実装し、実際に計算を行った。その後、自作のプログラムから、より便利で柔軟なインターフェースを備えたオープンウェアに移行した。本博士論文の計算はすべてそのオープンウェアで行ったものである。ただし試行波動関数の初期値や超伝導相関は筆者が作成したプログラムを用いて与えた。

そしてmVMC計算から、二層や二本鎖のハバード模型において、一つのバンドがincipientになるリフシッツ転移点の近辺で、超伝導が最適化されることを示した。さらに超伝導相関のパラメータ依存性が摂動論の一種である揺らぎ交換 (FLEX) 近似の先行研究と類似することが明らかになった。このことは弱結合理論から示唆される描像、すなわち、低エネルギーのスピン揺らぎは主に強い繰り込みを生み、対破壊をもたらす一方で、有限エネルギーのスピン揺らぎは主に有効的なペアリングの糊を生み出すという描像が、強結合領域においても成立することを示している。ここで強調したいのは、FLEXとmVMCが整合するのは全く非自明であるということである。FLEXでは有効相互作用においてスピン揺らぎが優先的に取り入れられている。それに対し、mVMCでは多体効果が実空間描像で取り込まれており、それは強相関領域でより正確になることが期待される。

二層系は鉄系超伝導体の単一軌道の類似物と見なすことができる。そこで我々は一次元鎖や正方格子上の二軌道ハバード模型を再訪した。そして両方の系で様々な対称性の軌道内・軌道間ペアリングが生じ得ることを示した。さらに正方格子上の二軌道系では、二層ハバード模型と同様にincipientバンドによって超伝導が誘起されることが分かった。またクォーターフィリング近辺では、軌道準位差の増大に伴ってd波ペアリングが増強された。これは単一軌道の半分占有された正方格子上のハバード模型におけるd波ペアリングに相当する。

以上の結果は、非従来型超伝導の機構を理解する上で、強結合領域も含めて、系の次元性や多軌道性に依らず、スピン揺らぎのスペクトルが重要であることを示している。

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (加 藤 大 智)		
	(職)	氏 名
論文審査担当者	主 査 教授	黒木和彦
	副 査 教授	阿久津泰弘
	副 査 教授	越野幹人
	副 査 教授	松野丈夫
	副 査 准教授	Slevin, Keith

論文審査の結果の要旨

電子間に短距離斥力相互作用が働く二バンド電子系においては、スピン揺らぎが媒介するバンド間ペア散乱相互作用が超伝導発現の起源となりうるが、近年、一方のバンドがフェルミ面を形成せずにフェルミ準位のごく近傍にある”incipient band”の状況にあるときに、超伝導が増強され得ることが実験、理論の研究から示唆されている。最近の弱結合理論では、低エネルギーのスピン揺らぎが超伝導を抑制し、よりエネルギーの高いスピン揺らぎが超伝導を増強すると考えると、incipient bandによる超伝導の増強が理解できることが指摘された。しかしこのような弱結合議論は、スピン揺らぎをあらわに有効相互作用に取り込むという近似をしており、特に相互作用の大きい強相関領域における適用の妥当性は定かではない。

そこで加藤大智氏は、強相関係の取り扱いに威力を発揮する多変数変分モンテカルロ (mVMC) 法に着目し、この手法を用いることで二バンド電子系の超伝導の問題に取り組んだ。従来の変分モンテカルロ法が、主として波動関数の多体相関部分の最適化を行うのに対して、比較的新しい手法である mVMC 法は一体部分をも最適化するため、多数の変分パラメーターを有し、極めて複雑な構造を持つが、加藤氏は先行研究を独力で読み解き、プログラムの実装を行った。その後、mVMC 法のオープンウェアが公開され、そちらに移行したものの、加藤氏が独自のプログラムを開発・実装したことが、オープンウェアを使いこなすうえで大変有効であった。

加藤氏は、まず二層型正方格子と二本鎖梯子型格子上のハバード模型に対して mVMC 法を適用した。その結果、二層型格子と梯子型格子の共通点として、二つのバンド間のエネルギー差をコントロールするホッピングパラメーター(二層を結合する $t_{\perp}$ または二鎖を結合する t_r) が大きくなると、反結合バンドが incipient になることが運動量分布関数やスピン相関関数からわかり、その時同時に超伝導相関が発達することが示された。二つの模型の相違点としては、 $t_{\perp}$ または t_r の減少にともなって反結合バンドがフェルミ面を形成すると、超伝導相関関数が減衰するが、その減衰の仕方が、二層型では急峻であるのに対して、二本鎖では緩やかであった。また、電子間相互作用を減少させると、二層型では超伝導相関が大きく抑制されるのに対して、二本鎖ではあまり超伝導相関に大きな変化がないことがわかった。加藤氏は続いて、一次元、および二次元の二軌道模型に対して mVMC 法を適用し、多軌道性に起因して軌道内、および軌道間でのペアリングによる超伝導相関が発達することを示した。また、二次元の場合には、二つの軌道間のエネルギー差がある場合についても計算を行い、一方のバンドが incipient になるときに、超伝導相関が発達することを示した。

以上の超伝導相関の計算結果は、意外にも、弱結合理論(揺らぎ交換近似)によって計算された、線形化エリアシュベルグ方程式の固有値(超伝導転移温度の定性的な指標を与えると考えられる)の各種パラメーター依存性と類似したふるまいである。特に二層型と二本鎖模型の相違点において、スピン揺らぎをあらわに取り扱うことなく実空間描像で電子相関を取り込んだ mVMC 法による結果と、弱結合理論である揺らぎ交換近似による結果とが相似することは、超伝導に対するスピン揺らぎの寄与がエネルギー領域ごとに異なるという描像が、弱相関から強相関領域まで幅広く成立していることを強く示唆する。

上記のように、本博士論文の研究内容は、今後の二バンド系超伝導の研究において重要な知見を与えている。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。