The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Development of efficient approximation methods in dynamical mean field theory for multi-degree-of-freedom systems
Author(s)	水野, 竜太
Citation	大阪大学, 2020, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/77586
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　　水野 竜太　　）	
論文題名	Development of efficient approximation methods in dynamical mean field theory for multi-degree-of-freedom systems (多自由度系における動的平均場理論の高効率な近似手法の開発)

論文内容の要旨

“相関効果”とは、平均場を超えた電子間の相互作用の効果を意味する。“強相関電子系”は相関効果が本質的な役割を果たす系のことを言う。そこでは、高温超伝導や金属絶縁体転移などの様々な魅力的な現象が現れる。しかしながら、この系の非摂動的な特性と多自由度性の絡み合いがこれらの現象の詳細な理解を妨げる。この困難を克服できる可能性を秘めた手法の一つが動的平均場理論(DMFT)である。DMFTは有効場の空間ゆらぎを無視する代わりに時間的揺らぎを正確に取り込む近似である。DMFTでは格子モデルを不純物モデルにマップすることで、非摂動的に問題を解く。この際に重要となる不純物ソルバーとしてよく用いられる連続時間量子モンテカルロ法(CT-QMC)や厳密対角化法(ED)は数値的に厳密である一方で計算コストが非常に大きく、特に多自由度系への適用やDMFTに空間揺らぎを取り込む拡張を行う際に、現実的に計算が実行できないとこも珍しくない。一方、数値計算コストの低いソルバーである反復摂動法(IPT)は近似理論であるがゆえに、多自由度系や空間相関の取り込む拡張を柔軟に行うことができない。

そこで本研究では、IPTを計算コストを抑えたまま、多自由度系への適用や空間相関を取り込む拡張が柔軟に行えるような形で定式化を行った。2体の相関関数の中の相互作用の情報の全てを担っている量であるフルバーテックスを用いた厳密な自己エネルギーの表式と、IPTの自己エネルギーを見比べると、IPTは疑似的な周波数構造によって強相関効果をとらえることができている近似と見なせることがわかる。それと同時に、IPTは2体の揺らぎから来る一部の寄与を考慮できていないこともわかる。2体の揺らぎを系統的に評価することのできるParquet formalismに基づいた方法でこれらの寄与を見積もり、IPTに追加することで、多自由度系や空間相関の拡張が可能な形で定式化することができる。この定式化の際、上で述べた強相関効果をとらえる疑似的な周波数構造は、フルバーテックスをある変数分離形で近似することによって表現できることがわかった。このフルバーテックスの近似形を用いて、1体の量である自己エネルギーから2体の量のフルバーテックスを類推する方法も提案した。これにより、いかなる不純物ソルバーであっても、空間相関を取り込む拡張と組み合わせることができるようになる。ここで開発した手法を１軌道正方格子、2軌道Bethe格子、2軌道正方格子、2層正方格子のモデルに適用し、準粒子ウエイト・スペクトル・スピン感受率などの量を計算し、その結果を、数値的に厳密な手法と比較することでベンチマークを行った。各物理量は、定性的に良い一致を示しており、条件によっては定量的にもよく一致する。さらに、擬ギャップやMott転移、対称性の自発的破れなどの複雑な現象も、厳密な手法と良い一致を示している。

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　水野竜太　）		
論文審査担当者	（職）	氏　名
	主 査　教授	黒木和彦
	副 査　教授	浅野建一
	副 査　教授	越野幹人
	副 査　准教授	Slevin, Keith
	副 査　准教授	酒井英明

論文審査の結果の要旨

強相関電子系では、高温超伝導や金属絶縁体転移などの様々な魅力的な現象が現れるが、系の非摂動的な特性と多自由度性の絡み合いがこれらの現象の詳細な理解を妨げる。この困難を克服できる可能性を秘めた手法の一つが動的平均場理論(DMFT)である。DMFT は有効場の空間ゆらぎを無視する代わりに時間的揺らぎを正確に取り込む近似である。DMFT では格子モデルを不純物モデルにマップすることで、非摂動的に問題を解く。この際に重要となる不純物ソルバーとしてよく用いられる連続時間量子モンテカルロ法や厳密対角化法は数値的に厳密である一方で計算コストが非常に大きく、特に多自由度系への適用や DMFT に空間揺らぎを取り込む拡張を行う際に、計算が実行できないことも珍しくない。一方、数値計算コストの低いソルバーである反復摂動法(IPT)は近似理論であるがゆえに、多自由度系や空間相関の取り込む拡張を柔軟に行うことができない。

そこで水野竜太氏は、IPT を、計算コストを抑えたまま、多自由度系への適用や空間相関を取り込む拡張が柔軟に行えるような形で定式化を行った。水野氏は、2 体の相関関数の中の相互作用の情報の全てを担っている量であるフルバーテックスを用いた厳密な自己エネルギーの表式と、IPT の自己エネルギーを見比べ、IPT は疑似的な周波数構造によって強相関効果をとらえることができている近似と見なせることに気づいた。それと同時に、IPT は 2 体の揺らぎから来る一部の寄与を考慮できていないこともわかるため、2 体の揺らぎを系統的に評価することのできる Parquet formalism に基づいた方法でこれらの寄与を見積もり、IPT に追加することで、多自由度系や空間相関の拡張が可能な形で定式化することに成功した。また、水野氏は、この定式化の際、上で述べた強相関効果をとらえる疑似的な周波数構造は、フルバーテックスをある変数分離形で近似することによって表現できることに着目し、このフルバーテックスの近似形を用いて、1 体の量である自己エネルギーから 2 体の量のフルバーテックスを類推する方法も提案した。これにより、いかなる不純物ソルバーであっても、空間相関を取り込む拡張と組み合わせることができるようになった。

水野氏は、新しく開発した手法を 1 軌道正方格子、2 軌道 Bethe 格子、2 軌道正方格子、2 層正方格子のモデルに適用し、準粒子ウエイト・スペクトル・スピン感受率などの量を計算し、その結果を、数値的に厳密な手法と比較することでベンチマークを行った。各物理量は、定量的によい一致を示しており、さらに、擬ギャップや Mott 転移、対称性の自発的破れなどの複雑な現象も、厳密な手法と良い一致を示した。特筆すべきことは、水野氏の手法では、従来の方法に比べて飛躍的に計算時間が短縮されており、空間相関も高い分解能で取り込むことができる、という点である。また、新しい手法を用いて得られた物理的に重要な知見としては、銅酸化物を想定した一軌道模型に対して空間相関を取り込む計算を行い、ホールドープされたバンドフィリングに対してスペクトル関数に擬ギャップ的な構造を見出したこと、オンサイトエネルギーの異なる二つの軌道からなる二軌道模型において、二軌道の対称性が自発的に破れるタイプの軌道選択型モット転移が起こることを示したこと、2 層正方格子のモデルの計算を高い空間分解能で行い、スペクトル関数において擬ギャップ的な構造を見出したこと、があげられる。

上記のように、本博士論文の研究内容は、多自由度強相関電子系の新しい計算手法を水野氏が独自に開発したものとして高く評価できる。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。