

博士論文公聴会の公示（物理学専攻）

学位申請者： 水野竜太

論文題目： 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）

日時： 2020年8月7日（金） 13:30 - 15:00

場所： 理学研究科 H 棟 7 階セミナー室（H701 号室）

（部屋の換気等、新型コロナウイルス感染症拡大防止に留意しつつ、対面形式にて行います。ご来聴の方はマスクの着用をお願い致します。）

主査： 黒木和彦

副査： 浅野建一、越野幹人、酒井英明、Keith Slevin

論文要旨：

強相関電子系においては、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、そ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り、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空間揺らぎを取り込む拡張を行う際に、現実的に計算の実行が困難となる。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。

以上を踏まえ、本研究では、IPT を数値計算コストを抑えたまま、多自由度系や空間相関を取り込む拡張が可能な形で定式化を行った。IPT の自己エネルギーと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捉えている近似と見なせることがわかる。それと同時に、IPT が考慮できていない周波数構造があることもわかる。この周波数構造を Parquet formalism に基づいた方法で評価し、IPT に追加することで多自由度・空間相関の拡張が可能な形で定式化することができる。この定式化の際に得られた知見から、1 体の量から 2 体の量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も空間相関を取り込む近似を組み合わせることができる。これらの手法を 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た。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い、調べた範囲内において、良い一致が得られることを示した。