

Nara Women's University

【内容の要旨及び審査の結果の要旨】 汎関数くりこみ群法によるエキシトニック絶縁体および電荷秩序状態の低次元揺らぎの理論的研究

メタデータ	言語: 出版者: 公開日: 2022-05-20 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 金子,萌 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10935/5794

(別紙1)

論文の内容の要旨

氏名	金子 萌		
論文題目	汎関数くりこみ群法によるエキシトニック絶縁体および電荷秩序状態の低次元揺らぎの理論的研究		
審査委員	区分	職名	氏名
	委員長		
	委員		
内容の要旨			
<p>強相関電子系は、物質中において電子間の相互作用が本質的に重要な効果をもたらす系であり、高温超伝導をはじめとする多種多様な性質を示すことから多くの研究者を惹きつけ、物理学研究の中心テーマの1つとして認識されている。物質 1cm^3 中に 10^{23} 個存在する電子を取り扱う物質科学の理論研究において、伝統的手法として用いられているのがファインマン・ダイアグラムに基づいた摂動計算である。しかしながら強相関電子系においては、摂動の低次の計算では多くの実験結果を説明することができず、正確な解析のためには、電子間相互作用効果を摂動の無限次まで取り込む必要がある。これを可能とする理論として近年注目され発展しているのが「汎関数くりこみ群(fRG)法」と呼ばれる理論である。fRG法は、多体相互作用による寄与を正確に取り扱うことができるだけでなく、相互作用項の波数依存性や自己エネルギー補正項の効果を正確に取り込むことができるという大きなメリットを持っている。しかし、これまでのfRG法を用いた解析においては、生成された多体相互作用項を無視し、また、相互作用項の波数依存性を無視する近似が行われてきた。このため、fRG法はくりこみ群法の新しい枠組みであるにも関わらず、得られる結果は従来の摂動論的くりこみ群法によるものの範疇を超えていなかった。本学位論文の研究では、fRG法の上記のメリットを活かし、相互作用項の波数依存性と自己エネルギー補正項を正確に取り込み、エキシトニック絶縁体の低次元揺らぎと、分子性導体の電荷秩序状態における低次元揺らぎの効果を論じている。</p> <p>以下、論文の構成とその内容について述べる。</p> <p>第1章では、研究の背景および目的を述べている。低次元強相関電子系の理論解析に用いられてきた従来の手法と問題点、および、その問題を解決することができるfRG法のメリットを明確に説明している。また、本学位論文の研究で着目した2つの強相関物質に関する研</p>			

究背景の説明を行っている。第2章では、fRG法の一般的な定式化を行い、第3章では、具体的に、生成される多体相互作用項について、くりこみ群方程式を導出している。

第4章では、エキシトニック絶縁体の低次元揺らぎの解明についての研究結果が示されている。「エキシトニック絶縁体」とは、伝導バンドの電子と価電子バンドのホールが結合することで絶縁体となることが理論予言されていた、新奇な電子状態である。近年、遷移金属カルコゲナイド Ta_2NiSe_5 における角度分解光電子分光 (ARPES) 実験において、価電子バンドの上端がフラット化することが見出され、この物質がエキシトニック絶縁体の有力な候補として考えられ、大きな注目を集めている。本学位論文では、エキシトニック絶縁体候補物質 Ta_2NiSe_5 における1次元揺らぎの効果を明らかにすることを目的とし、fRG法を適用することにより、1粒子励起スペクトルの理論解析を行っている。fRG法のメリットの1つとして、生成される多体相互作用項について、波数依存性を含んだまくりこみ群が定式化されていることがあげられる。本学位論文ではこのメリットを活用し、自己エネルギー補正項について、波数依存性を取り込んだ形でくりこみ群方程式を導出し、これを数値的に解析している。これにより、相互作用効果をバイアスなく無限次まで取り込むことのできる強力な理論形式である fRG 法に基づいて、1粒子励起スペクトルを解析することに初めて成功している。この解析の結果、電子とホールとの斥力相互作用効果により、対称性の破れを伴わないエキシトンの準長距離秩序が実現し、1粒子励起スペクトルにギャップ構造が出現することを明らかにしている。さらに本学位論文では、この解析に基づいて、ARPES 実験結果との対応を議論している。これまでの ARPES 実験によると、エキシトニック相の相転移温度よりも十分高温からバンドのフラット化が観測されており、この高温領域において、エキシトニック状態の揺らぎが発達していることが指摘されていた。この状態は、「preformed exciton 状態」と呼ばれ、実験的・理論的に注目されてきたが、その出現メカニズムは未解明であった。本学位論文では、この preformed exciton 状態の出現が1次元揺らぎに起因している、という新しいメカニズムを提案している。

第5章では、電荷秩序状態近傍で発達する低次元揺らぎの解明についての研究結果が示されている。分子性導体では、長距離のクーロン斥力が重要な役割を果たし、電子が周期的に配列した「電荷秩序状態」が実現する。近年では、この電荷秩序状態を、光などの効果で揺らがせることにより、特異な非線形・非平衡現象が生じることが実験的・理論的に議論されている。本学位論文は、揺らぎの効果が重要となる領域である、金属状態（朝永-Luttinger 液体）と電荷秩序状態との境界領域において、1粒子励起スペクトルの性質を明らかにすることを目的としている。従来のフェルミオン表示に基づいたくりこみ群法による解析では、相互作用の波数依存性が無視されており、この近似のため、そもそも、電荷秩序状態を理論的に記述することができていなかった。本学位論文では、相互作用の波数依存性を取りこんだまくりこみ群方程式を導出できるという fRG 法のメリットを活用し、電荷秩序状態の記述に初めて成功している。この fRG 法による解析は、厳密解より得られていた金属・電荷秩序転移の振る舞いを、定性的かつ定量的に再現することが示されている。さらに、自己エネルギー補正項のくりこみ群方程式を導出し、1粒子励起スペクトル関数の解析を行っている。この枠組みに基づいて状態密度のエネルギー依存性を解析した結果、朝永-Luttinger 液体領域における冪的な擬ギャップ的な振る舞いから、電荷秩序状態における指数関数的なギャップ的振る舞いへの移り変わりをあらわに示すことに成功している。

最後に、第6章では、本学位論文で得られた成果のまとめが行われ、その意義が示されている。

(別紙2)

論文審査の結果の要旨

氏名	金子 萌		
論文題目	汎関数くりこみ群法によるエキシトニック絶縁体および電荷秩序状態の低次元揺らぎの理論的研究		
審査委員	区分	職名	氏名
	委員長		
	委員		
要旨			
<p>本学位論文は、汎関数くりこみ群法を適切に活用し、エキシトニック絶縁体および電荷秩序状態の低次元揺らぎに関する緻密な理論研究をまとめたものである。</p> <p>物質科学の理論研究において、伝統的手法として用いられているのがファインマン・ダイアグラムに基づいた摂動計算である。しかしながら、強相関電子系においては、摂動の低次の計算では多くの実験結果を説明することができず、正確な解析のためには、摂動の無限次まで取り込む必要がある。現在の強相関電子系の理論研究において、相互作用効果を摂動の無限次まで取り込むための標準的手法として用いられている手法の1つが、乱雑位相近似(RPA)である。しかしながら、揺らぎが特に強い1次元電子系において実現する「朝永-Luttinger 液体」と呼ばれる状態では、複数の揺らぎが共存するため、ある特定の系列のダイアグラムに限定して摂動の無限次まで取り込む手法であるRPAでは、朝永-Luttinger 液体を記述することができない。この朝永-Luttinger 液体を理論的に記述するためには、ダイアグラムをバイアスなく無限次まで取り込む必要がある。これを可能とする理論として近年注目されているのが、「汎関数くりこみ群(fRG)法」である。fRG法は、多体相互作用による寄与を正確に取り扱うことができるだけでなく、相互作用項の波数依存性や自己エネルギー補正の効果を正確に取り込むことができるという大きなメリットを持っている。しかしながら、これまでのfRG法を用いた解析では、生成された多体相互作用項を無視し、また、2体相互作用項についても、波数依存性を無視する近似が行われてきた。このため、fRG法はくりこみ群法の新しい枠組みであるにも関わらず、得られる結果は従来の摂動論的くりこみ群法によるものの範疇を超えていなかった。</p> <p>本学位論文では、fRG法を活用し、自己エネルギー補正項と相互作用項の波数依存性の効果を取り込んだ解析を行なっている。これにより、1粒子励起スペクトル関数と電荷秩序状態</p>			

の解析を初めて可能にしており、新しい理論枠組みである fRG 法を適切に活用した解析を行なっているという点が、本学位論文における理論的な側面として、高く評価できる。

本学位論文では、この fRG 法に基づいて、遷移金属カルコゲナイド Ta_2NiSe_5 と分子性導体という 2 つの強相関物質の電子状態に注目した研究が展開されている。

近年、遷移金属カルコゲナイド Ta_2NiSe_5 における角度分解光電子分光 (ARPES) 実験において、価電子バンドの上端がフラット化することが見出され、エキシトニック絶縁体の有力な候補として考えられ、注目されてきた。この系の第一原理バンド計算によれば、Ta 原子による伝導バンドと、Ni 原子および Se 原子による価電子バンドは接近しており、ともに 1 次元的なバンド構造を持つことが知られていた。しかしながら、これまでの理論研究において、1 次元特有の揺らぎの効果は注目されてこなかった。

本学位論文では、エキシトニック絶縁体候補物質 Ta_2NiSe_5 において、1 次元揺らぎの効果に注目し、fRG 法を活用することにより、1 粒子励起スペクトルの理論解析を行っている。これまでの ARPES 実験によると、エキシトニック相の相転移温度よりも高温側からバンドのフラット化が観測されており、この高温領域において、エキシトニック状態の揺らぎが発達した preformed exciton 状態が実現することが指摘されていたが、その出現メカニズムは未解明であった。本学位論文の研究では、この preformed exciton 状態が 1 次元揺らぎに起因している可能性を提案し、対称性の破れを伴うことなく、1 粒子励起スペクトルにギャップ構造が出現することが可能であることを明確に示している。本学位論文において、fRG 法に基づいて 1 粒子励起スペクトル関数を解析することを初めて可能にしたという理論的な側面だけでなく、実験との対応を詳細に議論し、preformed exciton 状態でのギャップ構造の出現について、1 次元揺らぎという、新しいメカニズムを提案したという点で、これらの結果は高く評価できる。

次に、分子性導体における電荷秩序状態に注目し、fRG 法を活用することにより、金属・電荷秩序転移の記述、およびその転移近傍での 1 粒子励起スペクトルの解析を行なっている。従来のフェルミオン表示に基づいたくりこみ群法による解析では、波数依存性が無視されており、この近似のために、そもそも、電荷秩序状態を理論的に記述することができていなかった。fRG 法のメリットの 1 つとして、波数依存性を取りこんだまくりこみ群を定式化できることがあげられる。本学位論文では、このメリットを活用し、フェルミオン表示に基づいて、電荷秩序状態の記述に初めて成功している。得られた結果は、厳密解より知られていた金属（朝永-Luttinger 液体）から電荷秩序状態への相転移を、定性的かつ定量的に再現している。さらに、状態密度のエネルギー依存性の解析結果から、朝永-Luttinger 液体領域における冪的な擬ギャップ的振る舞いから、電荷秩序状態における指数関数的なギャップ的振る舞いへの移り変わりを示すことに成功している。本学位論文の研究により、汎関数くりこみ群の有用性を明確に示すとともに、非線形・非平衡現象解明の鍵となる 1 粒子励起の性質を解明することができたという点で、これらの結果は高く評価できる。

以上のように、本学位論文は、汎関数くりこみ群を活用することで、低次元強相関電子系の重要な知見を得て、さらに実験結果を説明する新しいメカニズムを提案した研究として価値があると認められる。また、本学位論文の研究の一部は、すでに査読付き欧文学術誌に掲載されている。よって、本学位申請論文は、奈良女子大学博士（理学）の学位を授与されると十分な内容を有していると判断した。