

論文内容の要旨

博士論文題目

1次元強相関電子系の静電場における非線形分極応答に関する研究

氏名

小山 幸伸

(論文内容の要旨)

強相関電子系は、高温超伝導などの様々な興味深い性質を持ち、現在も物性物理学の中心的課題の一つである。特に低次元強相関系においては、強い電子相関と量子揺らぎのために、平均場などの近似が有効ではなく、数値厳密対角化などの数値計算による手法が重要となる。しかし、強相関電子系の標準モデルであるハバードモデルなどの多体ハミルトニアンに関する厳密解を求める場合には、たかだか原子 20 個程度の系しか取り扱えない。このような小さな系においては、相転移現象を解析する際に重要な長距離相関等の議論も困難であり、結果は有限サイズ効果の影響を大きく受ける。すなわち強相関電子系特有の集団現象をごく少数の電子で議論する点に問題がある。そこで大きな系においても電子相関効果を充分に取り入れることを可能にするために、変分モンテカルロ法によるプログラムを開発し、これを1次元と2次元ハバードモデルに適用した。変分波動関数として Gutzwiller 関数にハミルトニアン⁽¹⁾のべき乗を作用させたものの有効性を検討した。予備計算として、14 サイトの1次元系において2次までのべき乗を作用させることにより、広いパラメータ領域 ($2 \leq U/t \leq 10$; U は同一サイトクーロンエネルギー、 t は最近接サイト間の重なり積分) でハバードハミルトニアン⁽²⁾の基底状態の相関エネルギー比が 98.5% 以上になるという非常に良い結果が得られ、この方法の有効性が示した。次に、低次元強相関電子系における巨大な非線形光学応答の起源を考察するために、上記の数値計算手法を用いた数値計算手法を用いて、半充填の1次元ハバードモデル(モット絶縁体状態)に静電場を印加した場合の分極応答について充分に大きな系(最大 64 サイト)で数値解析を行った。電気分極を変分モンテカルロ法で計算したが、非線形分極を数値的に求めるには統計誤差を抑える必要があり、膨大なサンプルを計算すること必要が生じたために、べき乗を作用させない Gutzwiller の変分関数を採用した。 $U/t > 4$ の領域では、 U/t が大きくなるに従って、3次の非線形感受率 $\chi^{(3)}$ は急激に増加し、 $U/t = 10$ の場合の $\chi^{(3)}$ は $U/t = 2$ での値の 10 倍程度の大きさになることを示した。この特徴的な $\chi^{(3)}$ の U/t 依存性は、誘起される電荷の分析から以下のように理解できることが分かった。すなわち、 $U/t < 4$ の弱相関領域においては、静電場に対する反応は、従来のバンド描像に基づいて理解することができるが、 $U/t > 4$ の強相関領域においては、電荷は単なる電子やホールではなく、エキゾチックなダブロンやホロンとしての性質を持つようになる。そして、 $\chi^{(3)}$ の急激な上昇は、電荷の量子ゆらぎとして存在するダブロンとホロンの数の変化によるものである。このようにして、1次元強相関系の巨大な光学的非線形性は、強相関系に特有な電荷の特異な性質に由来することを明らかにした。

(論文審査結果の要旨)

低次元強相関電子系は、高温超伝導を示すことは良く知られているが、その特異な光学的特性も最近着目されている。特にその巨大な非線形光学効果と超高速応答は応用研究の観点からも関心が持たれている。しかしながら、低次元強相関電子系における非線形光学応答のこれまでの解析は、サイズの小さな系における数値計算、または3準位モデルやスピンの自由度を無視した簡単なモデル計算に基づくものであった。本論文では、低次元強相関電子系における巨大な光学非線形性の起源を明らかにするために、大きなサイズの系にも適用できる変分モンテカルロ法によるプログラム開発を行った。まず比較的小さなサイズの系において、ハミルトニアンへのべき乗を作用させた Gutzwiller の変分関数を用いて計算した相関エネルギーを厳密解と比較することにより、変分モンテカルロ法が十分に精度の良い方法であることを示した。それに基づいて、半充填の1次元ハバードハミルトニアン(モット絶縁体の状態)に対する非線形電場応答を十分大きな系(64サイト)について定量的に計算し、以下のような重要な結果を得た。

非線形分極を数値的に求めるには統計誤差を抑える必要があり、膨大なサンプルを計算する必要が生じたために、ハミルトニアンへのべき乗を作用させない Gutzwiller の変分関数を採用した。 $U/t > 4$ (U は同一サイトクーロンエネルギー、 t は最近接サイト間の重なり積分)の領域では、 U/t が大きくなるに従って、3次の非線形感受率 $\chi^{(3)}$ は急激に増加し、 $U/t = 10$ の場合の $\chi^{(3)}$ は $U/t = 2$ における値の10倍程度の大きさになることが示された。この特徴的な $\chi^{(3)}$ の U/t 依存性は、誘起される電荷の分析から以下のように理解できることが分かった。すなわち、 $U/t < 4$ の弱相関領域においては、静電場に対する反応は、従来のバンド描像に基づいて理解することができるが、 $U/t > 4$ の強相関領域においては、電荷は単なる電子やホールではなく、エキゾチックなダブロンやホロンとしての性質を持つようになる。そして、 $\chi^{(3)}$ の急激な上昇は、電荷の量子ゆらぎとして存在するダブロンとホロンの数の変化によるものである。このようにして、1次元強相関系の巨大な光学的非線形性は、強相関系に特有な電荷の特異な性質に由来することが明らかにされた。

以上のように、本論文は、低次元強相関電子系の非線形静電場応答を大きなシステムサイズで定量的に解析し、モット絶縁体における量子揺らぎによって生じた特異な電荷の振る舞いを明らかにしたもので、低次元強相関電子系のエキゾチックな物性を解明する上で重要な知見を得た。よって、審査員一同は、本論文が博士(理学)の学位論文として価値のあるものと評価し、審査結果を合格と認めた。