

論文要旨

Abstract

論文題目

Title Theoretical Study of Momentum-Dependent Local-Ansatz Variational Approach to Correlated Electron System. (相関電子系における運動量依存局所変分理論の研究)

We propose in this thesis a local-ansatz wavefunction approach with momentum dependent variational parameters (momentum-dependent local-ansatz = MLA) in order to describe correlated electrons in the ground state. The idea is to choose the best local basis set obtained from the two-particle excited states in the momentum representation by projecting out those states onto the local subspace and by controlling the amplitudes of the excited states in the momentum space. Within a single-site approximation we calculate the ground-state energy and derive a self-consistent equation for the variational parameters by minimizing the energy. We obtain an approximate solution which interpolates between the weak Coulomb interaction limit and the atomic limit. We further developed the theory to obtain the best value of the variational parameter self-consistently.

In order to verify the validity of the MLA, we perform the numerical calculations for the non-half-filled band as well as half-filled band in the Hubbard model on the hypercubic lattice in infinite dimensions. We confirm that the self-consistent scheme significantly improves the correlation energy, the momentum distribution and quasiparticle weight. We also demonstrate that the theory improves the standard variational methods such as the local-ansatz approach (LA) and the Gutzwiller wavefunction approach (GW); the ground-state energy in the MLA is lower than those of the LA and the GW in the weak and intermediate Coulomb interaction regimes. The double occupation number is shown to be suppressed as compared with the LA. Calculated momentum distribution functions show a clear momentum dependence, which is qualitatively different from those of the LA and the GW. We also obtained the critical Coulomb interaction $U_{c2} = 3.40$ at which effective mass of electrons diverges. The value is comparable to the best value $U_{c2} = 4.10$ based on the numerical renormalization group method.

We propose an improved MLA wavefunction which can describe the strong Coulomb interaction regime by modifying the starting wavefunction from the Hartree-Fock (HF) type to an alloy-analogy (AA) type wavefunction. Numerical results based on the half-filled band Hubbard model on the hypercubic lattice in infinite dimensions show that the MLA-AA wavefunction yields the ground-state energy lower than the GW in the strong Coulomb interaction regime. The MLA-AA yields the metal-insulator transition at $U_c = 3.26$. Calculated double occupation number is smaller than the result of the GW in the metallic regime, and is finite in the insulator regime as it should be, while the GW gives the Brinkman-Rice atom. Furthermore, the momentum distribution of MLA-AA shows a momentum-dependence in both the metallic and insulator regions, on the other hand the GW as well as the LA gives the constant value below and above the Fermi level.

Finally, we generalize the variational theory of the MLA by introducing a hybrid (HB) wavefunction as a starting wavefunction, whose potential can flexibly change from the HF type to the AA type by varying a weighting factor from zero to one. The MLA-HB scheme yields the ground-state energy lower than that of the GW in the whole Coulomb interaction regime, and shows the first-order transition at $U_c = 2.81$ from the Fermi liquid to the non-Fermi liquid, indicating the metal-insulator transition. The MLA-HB reduces the double occupancy more effectively than the GW and the LA in the weak U region. The resulting double occupancy jumps at the transition point $U_c = 2.81$, and again monotonically decreases with increasing U . Finally the momentum distribution of MLA-HB shows a distinct momentum dependence, which is qualitatively different from that of the GW.

Name Md. Atiqur Rahman Patoary

(様式第5-2号) 課程博士

平成25年 8月 8日

琉球大学大学院
理工学研究科長 殿

論文審査委員

主査 氏名 梯 祥郎

副査 氏名 稲岡 毅

副査 氏名 安田 千寿



学位（博士）論文審査及び最終試験の終了報告書

学位（博士）の申請に対し、学位論文の審査及び最終試験を終了したので、下記のとおり報告します。

記

申請者	専攻名 海洋環境学 氏名 MD. Atiqur Rahman Patoary 学籍番号 108609A	
指導教員名	梯 祥郎	
成績評価	学位論文 <input checked="" type="radio"/> 合格 <input type="radio"/> 不合格	最終試験 <input checked="" type="radio"/> 合格 <input type="radio"/> 不合格
論文題目	Theoretical study of momentum dependent local-ansatz variational approach to correlated electron system (相関電子系における運動量依存局所変分理論の研究)	
審査要旨 (2000字以内)		
<p>物質の電子状態は物質の性質を理解する上で決定的な役割を果たしており、いわゆる固体内電子エネルギーバンド理論によって金属・半導体・絶縁体の多くの側面がマイクロなレベルから解明されていることは良く知られている。しかしながら、同時に、物質の中には、バンド理論に代表される独立粒子描像に基づく理論では本質的に説明できない現象も数多く知られている。とりわけ、近年、物理学の発展と共に、物質における磁性の発生や、金属・絶縁体転移、高温超伝導、重い電子系の出現などの物質の</p>		

特異な性質の多くが強い電子間相互作用に起因するものであることが明らかになり、独立粒子の描像を超えて電子間相互作用を真正面から取り入れる多体電子理論の研究が活発になっている。

本研究は、基底状態における多体電子理論、即ち、電子相関の理論を変分法の立場から発展させたものである。変分法に基づく電子相関の理論は古くから多くの理論家によって考えられてきた。良く知られたグッツウィラー変分理論では、電子の2重占有状態の確率振幅を最適化する変分波動関数を導入する。また、局所相関変分理論では、残留電子間相互作用によって広げられるヒルベルト空間をハートレー・フォック波動関数に取り入れて電子相関を取り入れる。しかし、従来のこれらの理論は、正しい弱相関極限を与えないことが知られており、その定量性に問題がある。申請者は、第1に、これを改良するために、従来の局所変分波動関数に新しい運動量依存変分パラメータを導入することによって、これを克服し、弱相関領域から中間結合領域までの電子相関を定量的に説明する理論を構築した。さらに、任意の電子数に対して理論を適用できるように、2段階変分によって運動量依存変分パラメータの最適化を行う方法を確立した。

第2に、この運動量依存変分理論を強相関系へ拡張するために、申請者は変分理論の出発点となるハートレー・フォック基底波動関数に電子相関の強い領域で妥当な合金類の波動関数を変分的に混合させるハイブリッド波動関数を導入し、弱相関から強相関までの電子相関を定量的に記述する新しい変分理論を構築した。そして、無限次元ハバードモデルに対して、弱相関から強相関までのエネルギー、二重占有数、運動量分布関数、準粒子有効質量などを具体的に数値計算によって求め、新しい運動量依存局所変分理論が定量的に妥当な理論であることを確かめた。低次元系では、コンピューターを用いてグッツウィラー変分理論を超える数値理論がいくつか提案されているが、高次元系で弱相関から強相関までをつなぐ解析的変分理論としては、本理論が最初のものである。本論文で提出されたハイブリッド型運動量依存変分理論は、従来最も良く使われてきた解析的グッツウィラー変分理論を超えるものであり、今後、理論を現実的なハミルトニアンに適用することにより、低エネルギー領域における電子相関の詳細な性質を定量的に明らかにし、物質に対する理解を飛躍的に進展させるものと期待される。

審査会では、5月1日(水)の予備審査を経て、7月8日(月)に第1回審査会を行い、その後、8月8日(木)16:30から1時間にわたり博士論文発表会(最終試験)を行った。発表会では、研究の背景と目的ならびに成果を分かりやすく表現するプレゼンテーションを行い、質疑に対して的確な説明を行うことができた。以上の経過を踏まえて、最終試験終了後に第2回審査会を開き、検討を行った結果、全員一致で本申請者の学位論文ならびに最終試験を合格と判断した。