

# 琉球大学学術リポジトリ

## Theoretical Study of Momentum Dependent Local-Ansatz Variational Approach to Correlated Electron System

メタデータ	言語: 出版者: 琉球大学 公開日: 2014-04-24 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: パトアリ, エムディ アティクール ラーマン メールアドレス: 所属:
URL	<a href="http://hdl.handle.net/20.500.12000/28554">http://hdl.handle.net/20.500.12000/28554</a>

(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ミ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似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。