

琉球大学学術リポジトリ

電子相関の強い系に対する第一原理運動量依存局所 変分理論：鉄の電子状態への応用

メタデータ	言語: 出版者: 琉球大学 公開日: 2016-10-06 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: Chandra, Sumal, チャンドラ, シュマル メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/20.500.12000/35385

(様式第5-2号) 課程博士

平成28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 椎名 亮輔
副査 氏名 安田 千寿
副査 氏名 柳澤 将



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 Chandra Sumal 学籍番号 138609D	
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	First-Principles Theory of Momentum Dependent Local Ansatz to Correlated Electron Systems -Application to Iron- (電子相関の強い系に対する第一原理運動量依存局所変分理論-鉄の電子状態への応用-)	
審査要旨 (2000字以内)		
物質の多様な性質を決めている電子の運動状態とその振る舞いは電子状態と呼ばれ、電子状態を定量的に記述する問題は物性理論物理学の主要な基本的課題として古くから研究が行われている。とりわけ近年、物質の磁性、金属・絶縁体転移、高温超伝導、重い電子系などの物性において電子が互いに避けあう効果、即ち、電子相関の重要性が明らかになり、電子間相互作用の強い系におけ		

(次頁へ続く)

審査要旨

る電子状態の定量的記述が重要になってきている。従来の密度汎関数理論に基づく、所謂、バンド理論ではこのような強い相互作用をもつ電子の振る舞いを定量的に記述する事は困難であることから、現在、様々な方向から理論の改良が活発に試みられている。

本論文では、最近発展してきた運動量依存局所変分波動関数理論 (MLA) に注目し、これを多軌道系に拡張して、第一原理強束縛 LDA+U ハミルトニアンと呼ばれる第一原理ハミルトニアンに適用して固体内電子相関を定量的に記述する第一原理運動量依存局所変分理論 (第一原理 MLA) を提出し、さらに、これを常磁性鉄に適用してその定量性を明らかにしている。

第一原理 MLA 理論は運動量表示の全ての 2 粒子励起状態を取り入れて広げられたヒルベルト空間によって電子相関を記述するので、これまでの第一原理グッツウィラー変分理論では記述できなかった弱相関極限を厳密に記述すると共に、強相関領域における同理論の難点も改良できる大変優れた理論になっている。特に、本論文で提出された第一原理 MLA 理論が低エネルギー励起と直接関連する運動量分布関数や質量増大因子を定量的に記述できることは金属・絶縁体転移や重い電子系へ理論を応用する上で大変重要な意味を持っている。また、第一原理 MLA 理論は 3 種類の運動量依存演算子を導入しているために多軌道系に特有の原子内軌道間の電荷・電荷相関ならびにスピン・スピン相関を物理的に明確な形で記述できることや、全エネルギー・電荷揺らぎ・局在モーメントの振幅などの色々な物理量を定量的にしかも容易に計算できるなどの利点を有している。

申請者は新しい理論の定量性を確かめるために、鉄族遷移金属で電子相関が比較的強いと考えられている常磁性鉄に理論を適用し、1) 相関エネルギーとフント結合エネルギーを求め、それらが従来のバンド理論における磁気エネルギーの過大評価の問題を解決する事、2) 電荷揺らぎの大きさがこれまで考えられていた値より 2 倍程度大きくなること、3) 実験から評価されていた局在磁気モーメントの大きさを定量的に記述できる事、4) 光電子分光実験から得られた鉄の質量増大因子を定量的に説明できる事などを示している。

以上のように本論文で提出された第一原理運動量依存局所変分理論は電子相関の強い現実の物質の定量的記述を可能にするものであり、今後、本理論の具体的応用によって物質に対する理解を飛躍的に進展させることが出来ると期待される。

審査会では、5月6日(金)の予備審査を経て、7月8日(金)に第1回審査会を行い、7月19日(火)に本人から博士論文の内容について直接説明を聞き質疑応答を行った。その後、8月8日(月)16:30から1時間にわたり理学部313教室において博士論文発表会(最終試験)を行った。発表会では、研究の背景と目的、理論の内容、ならびに新しい成果を分かりやすく説明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3回審査会を開き、検討を行った結果、本研究成果は理学的に価値があり、提出された学位論文は博士の学位論文に相当するものと判断した。また、申請者は専門分野および関連分野の十分な知識ならびに琉球大学大学院理工学研究科博士後期課程修了者として十分な研究能力を有していることが確認できたので、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した。