

MERIT 長期海外派遣報告書

物理工学専攻 博士課程 3 年 (MERIT2 期生)

高井健作

研究課題名: 変分モンテカルロ法を用いた金属絶縁体転移の解明

1. 概要

2016 年 2 月 1 日から 3 月 28 日まで、ユリウス・マキシミリアン大学ヴュルツブルク (ドイツ) において Fakher Assaad 教授の下で研究活動を行った。

2. 研究の背景と滞在先の研究について

金属絶縁体転移 (モット転移) は銅酸化物高温超伝導体一般にみられ、有機導体では超伝導の発現する温度及び圧力の近傍で生じることが知られており、モット転移の臨界現象は高温超伝導と密接な関係があると考えられている。しかし、これまではモット転移が起きる有限温度領域では数値的に厳密な手法である量子モンテカルロ法 (QMC) が適用できないため、長距離にわたる電荷密度のゆらぎ (空間相関) を取り入れた高精度の理論計算が困難であった。受入れ先の Fakher Assaad 教授は、QMC およびクラスター動的平均場理論 (CDMFT) を用いて、ハバード模型における臨界現象や電子相関を取り入れたトポロジカル現象の解析などまで幅広く研究を行っている、強相関電子系における数値計算の第一人者である。近年、彼らは擬 1 次元系のハバード模型におけるモット転移の臨界現象 (次元クロスオーバー) の解明に精力的に取り組んでいる。しかし、CDMFT による計算では、空間相関が十分取り込めていないため、有機導体における実験結果とは異なり、磁性が介在したスレーター転移になってしまうという問題があった。

3. 共同研究の内容と結果

これまで、今田研究室では負符号問題が存在しない、高精度かつ高効率な基底状態の計算手法である多変数変分モンテカルロ法 (mVMC) のコードを開発し、研究を進めてきた。また、有限温度計算についても mVMC を時間依存変分原理 (TDVP) と組み合わせることにより、広汎な強相関電子系に適用可能な有限温度変分モンテカルロ法 (FT-VMC) の開発を行ってきた。滞在期間中は mVMC を擬 1 次元系のハバード模型における金属絶縁体転移に適用し、系統的にサイズを変えて (6×6 , 8×8 , 10×10 サイト)、二重占有度や運動量分布関数、スピン相関関数といった物理量の計算を行い、量子相転移点近傍での各物理量の振る舞いや相転移の性質について研究を行った。また、スピン相関関数の熱力学極限への外挿結果から、モット転移かどうかの判定を行った。その結果、取り扱うサイズやパラメータに依存するものの、CDMFT とは大きく異なる相図が得られることがわかった。今後は、より大きなサイズの計算に加えて、擬 1 次元系の金属絶縁体転移におけ

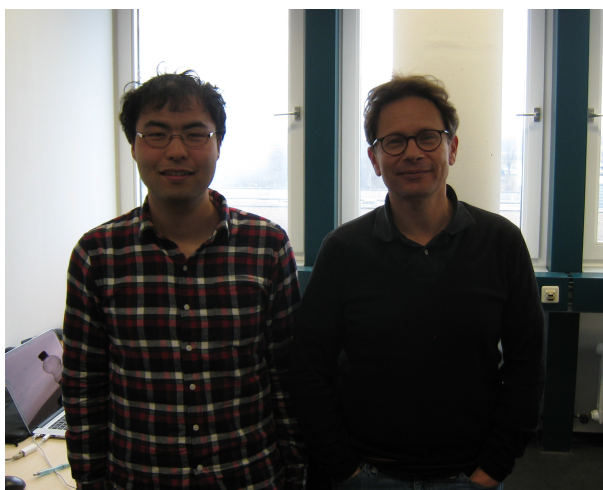
る臨界指数の計算や、FT-VMC を適用した有限温度の計算を考えている。今後も先方と月に 2-4 回程度 Skype で議論を行いながら、研究を進めていく。

4. 研究生活に関して

ヴェルツブルクはフランクフルトから ICE で 1 時間半の距離にある、人口 13 万人の小さな都市で、ブドウ畑が一面に広がるフランケンワインの主要な産地である。また、ロマンチック街道の起点の街であり、世界遺産に登録されているレジデッツがあるなど観光名所でもある。田舎の街であるため、主な交通手段はバスと路面電車(トラム)であり、ゲストハウスから丘の上にある大学までは毎日バスで通学していた。2, 3 月の滞在であり、朝は 7 時過ぎまで暗く日の入りも 5 時頃と早かったため、9 時過ぎに来て 19 時前には帰る生活をしてきた。研究室の学生・スタッフは英語が流暢だったが、ドイツはドイツ語が公用語であるため、スーパーマーケットやバス、電車では英語が通じずに苦労した。滞在期間中は、レーゲンスブルクで行われたドイツ物理学会(DPG)や滞在地のヴェルツブルクで行われた強相関電子系の理論計算に関する国内会議、若手研究者のミーティングにも積極的に参加し、ポスターセッションなどを通して他のドイツの学生と議論する機会にも恵まれた。

5. 謝辞

この度、長期海外派遣先として受け入れてくださった、Fakher Assaad 教授および秘書の Özge Özoglan さん、共同研究者の Marcin Raczkowski 博士、Assaad グループのメンバーには研究面だけでなくドイツでの生活面についても非常にお世話になりました。また、派遣先についてのアドバイスをいただき、派遣中もご助言をいただいた今田正俊教授、山地洋平特任講師にはこの場を借りて感謝致します。最後に、渡航を許可していただいた MERIT プログラムおよび関係者の皆様、副指導教員の山下晃一教授には、このような機会を与えていただき、本当にありがとうございました。



Fakher Assaad 教授との写真