

テクノロジーを基礎から支える物性理論

山形大学理学部
物理学科
教授



富田 憲一
TOMITA Norikazu

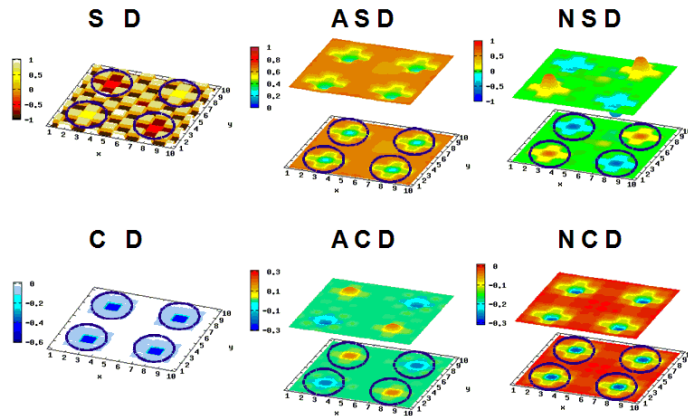
専門分野

強相関電子理論, 光物性

キーワード

高温超伝導, フラストレーション系, 光電子分光

研究紹介



分子や固体の物性を決定する上で、電子間相互作用が重要なファクターになる現象は数多くあります。高温超伝導はその代表ですが、こうした物性の機構解明や制御は未だ十分ではなく、現在の科学技術において、中心的研究課題のひとつになっています。理論の分野では、量子モンテカルロ法や密度行列繰り込み群法など、多くの数値計算手法が開発されています。しかし、平均場近似を越えた効果(電子相関)を記述する理論には、対称性や次元など、様々な制限があるのが現状です。共鳴HF法には、こうした制限がない上、電子相関効果を視覚的に表現できる点で、従来の数値計算手法よりも優れた多体理論になっています。共鳴HF法では、多体波動関数を非直交スレーター行列式(S-dets)の重ね合わせで記述します。

$$|\Psi\rangle = \sum_{f=1}^{N_S} C_f |f\rangle$$

ここで、重ね合わせの係数 C_f のみならず各S-det $|f\rangle$ の分子軌道まで最適化します。非直交S-detsを用いることで、軌道全体に及ぶ大きな電子相関を取り込むことが可能になります。更に最適化されたS-detsの構造から電子状態を視覚化できます。一例として、ホールをドーパした2次元ハバードモデルの波動関数を構成するS-detsを図に示します。10×10の系に4つのホールをドーパしたところ(電子数96)、スピン密度波の振幅(ASD)に4か所の欠陥を誘起し、そこにnetのスピン(NSD)と電荷(NCD)が現れます。これは、キャリアの単位がSchriefferたちの提唱したspin bagであることを示しています。

相談・要望に応じられる分野

出張講義・・・物性理論、数値シミュレーションに関する講義

研究内容&研究室

私達のグループでは、共鳴Hartree-Fock法を用いた電子相関に関する理論的な研究を行っています。本手法の最大の特長は電子間相互作用を記述できるだけでなく、平均場を超えた量子揺らぎを視覚的に表現できることです(一例が左の研究紹介)。

コンピューターを使いながら、物理的な内容について直接迫ることのできる手法は他になく、今後更に多くの物質系の電子状態解明に活躍するものと確信しています。

また、私達が行っているような多配置理論は、量子化学分野の第一原理計算にも応用され始めており、物理、化学の枠を超えて数値計算の新しいトレンドとなりそうです。

研究室には多くの大学院生が所属しており、博士後期課程の学生を中心に、高温超伝導の理論、フラストレーションを伴った三角格子の磁気秩序の解明など、精力的な研究を行っています。学会等での発表にも積極的です。

一方、博士前期課程で卒業する学生も、JR東日本や日立電線など大手一流企業に就職しています。

- 連絡先 (TEL/FAX/E-mail) 023-628-4559
- HP <http://phys.kj.yamagata-u.ac.jp/staff/tomita.html>