

論文審査の結果の要旨

氏名 武藤 覚

液体ヘリウム表面上に実現される古典2次元電子系や、シリコン電界効果トランジスタあるいは半導体ヘテロ接合の中に実現される縮退2次元電子系では、電子は2次元面内ではほとんど自由に運動する一方、垂直方向の運動に関しては最低量子化準位に束縛されている。これらの電子系は一様な正の背景電荷に浸った2次元電子ガスとしてモデル化され、基本的な多体問題の一つとして古くから理論研究が行われてきた。とくに液相から固相、いわゆるウィグナー固体への相転移は興味深い問題である。本論文は古典2次元電子系の相転移を、詳細な計算機シミュレーションによって論じたものである。

本論文は5章から構成される。第1章は序章であり、2次元電子系に関する過去の研究の簡潔なまとめと本研究の目的が提示される。第2章では古典2次元電子系の相転移に関する問題点の整理と、本研究で用いた計算手法の説明を行った後、静的分布関数からみた結晶化に関する計算結果が述べられる。第3章では系の動的性質に着目し、固相液相を問わず現れる特徴的な振動モードの起源が明らかにされる。第4章では量子揺らぎの効果について、過去の研究例と本人による計算機シミュレーションの試みが紹介され、第5章で本論文の結論がまとめられている。また本論文で用いられた計算手法の詳細が補遺にまとめられている。

本論文の焦点の一つは、クーロン相互作用する2次元系が長距離秩序をもつ固体に相転移するかどうかという問題である。2次元系では熱力学極限で真の長距離秩序が有限温度では存在しないことが、30年以上も前にN.D. Merminによって厳密に示されたが、クーロン相互作用はその証明の適用外であった。その後Merminの定理をクーロン系に拡張する試みがなされているが、いずれも近似の範囲をでない。本論文では能瀬とHooverによって定式化されたカノニカル分子動力学法を古典2次元電子系に初めて適用し、これまでに比べて多粒子・長時間のシミュレーションから結晶秩序を特徴づける2つの相関関数、すなわち位置相関関数と角度相関関数を求めた。その結果、固相の位置相関関数が距離に対してべき的に緩やかに減衰することがわかった。これはMerminの定理がクーロン相互作用にも適用できることを示唆している。一方、固相の角度相関関数は直ちに一定値に近づくことから、長距離角度秩序は存在していることがわかる。すなわち本研究で行われたシミュレーションの範囲では、固相は真の長距離秩序を持たずトポロジカルな秩序を持つ状態であり、液相への転移はこのトポロジカルな秩序の消失であると結論された。

一方、Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson, Young (KTHNY)は2次元の融解理論を用いて、液相と固相の間に準長距離の角度相関を持つ「hexatic」と呼ばれる中間相を予言していた。古典2次元電子系は、平均電子間距離での電子間相互作用エネルギーと温度の比「 Γ 」によって特徴づけられるが、本論文で得られた角度相関関数は、明らかな液相 ($\Gamma \leq 120$) と固相 ($\Gamma \geq 140$) の中間 ($\Gamma = 130$) でべき的な振る舞いを見せた。これは KTHNY の予言と一致する一方、得られた指数1は KTHNY の予言する $1/4$ という上限からは逸脱していた。しかしながら $\Gamma = 130$ では、シミュレーションのサイズ、時間等の制限から角度相関関数に大きな揺らぎがあり、hexatic 相の存在に関して明確な結論を導くことはできなかった。

また速度相関関数に関する過去の計算機シミュレーションで、古典2次元電子系にはほとんど温度によらない（固相、液相によらない）特徴的な振動の存在することが指摘されていたが、その起源はわかっていなかった。本論文では速度パワースペクトル密度から振動状態密度を計算して、それに対応する高周波ピークの存在を確認した。その起源をあきらかにするため、三角格子電子結晶の格子力学計算を行ったところ、定性的に同じ振動状態密度が得られ、上記の高周波ピークに対応する固有モードは最近接格子間で格子定数程度の波長でほぼ逆位相に振動するものであることがわかった。このことは2次元電子液体が、長距離秩序はないにもかかわらず、短波長の振動を維持するだけの明確な局所配置を持っていることを示唆している。

以上のように、本論文は古典2次元電子系の相転移現象という基本的かつ重要な問題について、いくつかの興味深い知見を与えており、審査委員全員一致により、博士論文として十分な内容をもつものと判定された。なお本研究は青木秀夫教授との共同研究であるが、論文提出者が主体となって理論を構築したものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断された。したがって審査員全員により、博士（理学）の学位を授与できると認めた。