

論文の内容の要旨

論文題目 Numerical study of the polaron problem by the diagrammatic quantum Monte Carlo
(ファインマン・ダイアグラム量子モンテカルロ法によるポーラロン問題の研究)

氏名 坂本 陽

1 個の粒子 (電子、励起子) がフォノンと相互作用する系は「ポーラロン」と呼ばれ、固体物理学における基本的問題の一つとして長い間研究されてきた。これまでの理論はいずれも近似を用いておりその適用条件すら明らかでないのが現状である。

ポーラロンに関する興味深い問題として自縄自縛現象がこれまで議論されてきた。従来の理論では粒子フォノン相互作用が短距離型の場合に格子歪みが非常に小さい状態 (自由状態) と格子歪みが非常に大きい状態 (自縄自縛状態) が共存し、粒子フォノン相互作用の結合定数が臨界値を超えると基底状態が自由状態から自縄自縛状態へと不連続的に変化すると考えられてきた。

絶対零度における温度グリーン関数 $G(\mathbf{k}, \tau)$ の摂動展開の各項はファインマン・ダイアグラムによって表される。このファインマン・ダイアグラムをダイアグラム中にある自由粒子のプロパゲーター、自由フォノンのプロパゲーター、粒子フォノン相互作用のバーテックスを全て乗じた量を重みとして確率的に更新する過程で τ の分布を調べれば $G(\mathbf{k}, \tau)$ を系統的誤差無しに計算することができる。(ファインマン・ダイアグラム量子モンテカルロ法) このようにして得られた $G(\mathbf{k}, \tau)$ に対して解析接続を行えばスペクトル密度 $\rho_{\mathbf{k}}(\omega)$ を求めることができ、自縄自縛現象に関する信頼性の高い議論を行うことが可能となる。

数値計算の結果、以下のことが明らかになった。

- ① これまで最も精力的に研究されてきたフレーリッヒ・ポーラロン (1 個の電子が分散を持たないフォノンと相互作用する系) の場合には 1 個の安定状態と 3 個の不安定状態が存在し、自縄自縛現象が起こらないことが判明した。
- ② ラシュバ・ペカール・ポーラロン (1 個のワニア励起子が分散を持たないフォノンと相互作用する系) の場合には 4 個の安定状態が共存することが確認された。前述したように従来の理論では自縄自縛現象を 2 個の状態が関与した準位交差であると考えられていたが、実際には 4 個の状態が関与した複雑な現象であることが初めて明らかになった。
- ③ 以上の結果を総合するとポーラロンに関して 4 個の状態が存在するという普遍性が存在する可能性があることが明らかになった。