審査の結果の要旨

論文題目　　Numerical study of the polaron problem by the diagrammatic quantum Monte Carlo

(和訳　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)

論文提出者氏名　　　坂本　陽

結晶中のキャリアーは格子歪みの衣を伴って運動するのでエネルギー、質量、易動度などの物理量は裸のキャリアーが持つ値から変化することになる。この問題はポーラロン問題と呼ばれ、場の量子論にとって最も基本的であるのみならず半導体等の応用分野でも重要な問題として古くから調べられてきた。特に豊沢らにより予言され実験でも見出された自由状態と自己束縛状態の間の準位交差による基底状態の不連続的変化（これを自己束縛現象と呼ぶ）は中間結合領域で起こる非摂動論的な現象として多大な関心が寄せられてきた。

この問題に対して摂動論、Feynmanによる経路積分法に立脚した変分理論、中間結合法、強結合理論などさまざまな理論的手法が適用されてきたが、これらの手法はすべて近似を含んだものであるのみならず励起状態の情報を得ることが困難であることから厳密な取り扱いが強く望まれていた。

坂本氏は近年発展したダイアグラム量子モンテカルロにestimator法という新しい手法を導入しグリーン関数の精度を飛躍的に改善することによってスペクトラム関数をFröhlich polaron模型と励起子のRashba-Pekar polaron模型の両者に対して高精度で計算することに初めて成功した。(スペクトラム関数を用いることによって初めて自己束縛現象の有無を数学的に厳密に定義することが可能となる。) 数値計算の結果から自己束縛状態がスペクトラム関数の振る舞いにどのように現れるかを初めて明らかにした。　本研究で得られた新しい知見は以下の通りである。

Fröhlich polaron模型：

（１） 長距離型相互作用を持つFröhlich polaron模型ではスペクトラム関数$I(\omega)$に対する摂動論がフォノンのサイドバンドの端で$I(\omega) \sim |\omega - E_0 - \omega_0|^{-1/2}$ (E_0: 基底状態のエネルギー、ω_0: フォノンのエネルギー) という発散を含み無限次の級数の和を取らねばならない。結合定数αが小さいときのスペクトラム関数を数値的に求めた結果、この端における関数形が$I(\omega) \sim |\omega - E_0 - \omega_0|^{1/2}$となり、さらに$\omega \cong E_0 + 3.5\ \omega_0$にピークが現れることを見出した。

（２） Fröhlich polaron模型に関しては自己束縛現象が起こらないとする断熱近似による理論と自己束縛現象が起こるという変分法を用いた理論の間で論争があった。数値計算の結果、中間結合領域のスペクトラム関数に安定励起状態に対応するデルタ関数

のピークが存在しないことを見出し、自己束縛現象が起こらないことを確立した。さらに、連続スペクトル部分には緩和励起状態に対応する共鳴構造（ピーク）が３つ存在し、α を変えてもその位置はほとんど変化せずに強度だけが変化することを見出した。つまり、自己束縛現象が起こらない場合でも自己束縛状態は励起状態として連続スペクトル中に存在し基底状態と交差しないだけであることが判明した。

Rashba-Pekar polaron 模型：

（１） 一方の Rashba-Pekar polaron 模型は短距離型相互作用を持ち、摂動論が発散を含まない。α が小さい時のスペクトラム関数に関して摂動論の結果と数値計算の結果は良い精度で一致することが判明した。

（２） 断熱近似による理論では、Rashba-Pekar polaron 模型で自己束縛現象が起こることが予想されていた。スペクトラム関数に関する数値計算の結果から、$\alpha \cong 18$ 付近で $\omega > E_0 + \omega_0$ の連続状態から励起状態が次々に“はがれてきて”、デルタ関数のピークとして現れることが判明した。このピークは最大３本現れ、自己束縛現象に２個以上の状態が関与していることを初めて見出した。この束縛状態は基底状態とクロスオーバーを示し、フォノンの非断熱性によるレベル間の反発が起こることを初めて実際の模型で確認した。

本論文は６章からなり、第１章ではポーラロン問題への Introduction と自己束縛現象に関する研究の背景、本研究の動機が述べられている。第２章では従来のダイアグラム量子モンテカルロ法とその問題点について述べられている。第３章では本研究で新たな手法として導入した estimator 法について述べられている。第４章ではこの新しい手法を用いて得られた上記の結果が Fröhlich polaron 模型、Rashba-Pekar polaron 模型それぞれについて述べられている。第５章ではこれらの結果を基礎に自己束縛現象に関する考察を行った。第６章は本研究の結論をまとめるとともに将来に残された課題を整理している。

本研究の独創的な点としては estimator 法をダイアグラム量子モンテカルロ法に導入して方法論をさらに発展させたこと、それを用いてポーラロンのスペクトラム関数を初めて計算し自己束縛現象に新たな知見を加えたことが挙げられる。ポーラロン問題の持つ豊かな側面の中で全く知られていなかった励起状態のスペクトルについて新たな知見を得るとともに場と相互作用する１粒子の問題に対する強力な理論的アプローチを大きく進歩させたといえるので、物理工学に寄与するところ大であると判断する。

よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。