

論文審査の結果の要旨

氏名 加藤康之

ボーズ・ハバード(BH)モデルは、ボーズ粒子の多体系の最も基本的なモデルの一つである。多孔質媒質中の液体ヘリウムや、超伝導ジョセフソン接合アレイなどの物理系のモデルとして議論されてきたが、近年実験的研究が急速に進展している光学格子中の冷却(ボーズ)原子系のモデルとしてもその重要性が増しつつある。BHモデルについては多くの解析的研究があるが、それらを検証することに加え、定量的な結果を得て実験結果と比較するには数値的研究が重要となる。特に、光学格子中の冷却原子系については、トラップポテンシャルの効果を含めた計算は数値的手法に依存するところが大きい。物性物理学の研究では数値計算の有限サイズ効果が問題になることが多いが、冷却原子系では実験系も有限の大きさで有限の粒子数を持つ。従って、数値計算上で実験系の忠実なエミュレーションを実現できる可能性がある。

本論文は、このような背景のもと、BHモデルについて効率のよい量子モンテカルロ法の手法を提案し、また実際にそれを適用して行った計算結果を議論したものであり、7章からなる。

第1章では、最近の冷却原子気体系についての実験研究の状況も含め、BHモデルとその量子臨界現象について研究する動機をまとめている。第2章は、BHモデルの平均場理論による解析結果と、量子臨界現象の数値的研究に必要な有限サイズスケージングについてのレビューである。第3章では、本論文で用いられる量子モンテカルロ法、特に、効率の良い現代的なクラスターアルゴリズムの一つである向きつきループアルゴリズムを導入した。しかし、BHモデルでは、各サイトを占有する粒子数に上限がなく、これが散乱バーテックス数を増加させ、向きつきループアルゴリズムの効率低下を招くことが指摘されている。この問題の解決策として、個々の散乱バーテックスを考慮する代わりに、単位虚時間あたりの散乱確率に基づいてアップデートを行う、修正向きつきループアルゴリズムを提案している。このアルゴリズムを実装した結果、計算効率が大きく向上することが示された。

第4章では、標準的な1成分の立方格子上のボーズハバードモデルの有限温度および絶対零度における相図を、修正向きつきループアルゴリズムに基づく計算によって決定している。この問題は今までに多くの手法で研究されているが、新たなアルゴリズムによって高い精度の結果を得ることができた。これに加え、向きつきループアルゴリズムの特性を活かして、モットギャップも求めている。さらに、最大エントロピー法を用いて動的相関関数を求めている。BHモデルは、超流動相では対称性の自発的破れを反映したギャップレスの南部ゴールドストーンモードを持つが、これに加えてギャップを持つ別のモードも存在することが理論的に予言されていた。本章の研究によってこのモードの存在をホールの励起については確認することができた。

第5章では、トラップポテンシャル中の冷却原子系に対応した、放物型の化学ポテンシャルを持つBHモデルの数値的研究を行っている。修正向きつきループアルゴリズムの採用により、サイト数が 64^3 、粒子数が 1.8×10^5 に達する大規模な計算が可能となってお

り、これは最近の冷却原子系の実験における典型的なサイズ（サイト数 65^3 , 粒子数 2.0×10^5 ）と同程度である。この系では、中心からの距離に応じて密度が変化し、それに伴って局所的に超流動相とモット相が交互に出現し殻上構造をなすが、この特徴を定量的に決定した。密度プロファイルなどについては、局所密度近似がかなり良い精度で成立することも確認した。また、超流動相の殻が2つ出現する場合、温度の低下とともに、まず内側の殻が超流動相に転移し、次に外側の殻が超流動層に転移するが、後者と同時に2つの殻の間の超流動相関も発達することがわかった。

第6章では、BHモデルの臨界現象の修正有限サイズスケールリングを論じている。修正有限サイズスケールリングには適用範囲があり、それを超えて適用すると誤った臨界指数を得ることを注意している。また、修正有限サイズスケールリングの成立とその限界を、1成分BHモデルの数値計算と、BHモデルの成分数が無限大の極限における解析解によって確認している。第7章では全体のまとめと考察を行っている。

以上のように、本論文では、BHモデルについて効率的な量子モンテカルロ計算のアルゴリズムを新たに提案し、これを応用してさまざまな興味ある結果を得ている。特に、最近の冷却原子系の実験と同程度のサイズの計算によって、超流動殻の形成やその温度変化について詳細な結果を得ており、今後の実験的研究へのインパクトも大きいと考えられる。

なお、本論文は、指導教員である川島直輝准教授その他との共同研究に基づいているが、本人の寄与は主体的で十分であると認められる。

よって、論文審査委員会は全員一致で博士（理学）の学位授与が適当であると認めた。