

論文審査の結果の要旨

氏名 ・ 川 俊 彦

強相関電子系分野において、幾何学的フラストレーションをもつ結晶格子の磁性は、最近特に注目を集めている研究課題である。実験的には三角・カゴメ格子などの擬2次元格子系や、スピネル・パイロクロア格子などのような3次元格子系が実現され、磁気応答に関する各種の測定が活発に行われている。中でも幾何学的フラストレーションの強い擬2次元系では、磁気秩序を持たないモット絶縁体相（いわゆるスピン液体相）が実現されると考えられており、その物理的描像も含め多くの理論研究が進行している。一方、現実の擬2次元結晶格子には小さいながらも面間相互作用が存在する。修士（理学）・川俊彦提出の学位請求論文では、幾何学的フラストレーションを有する擬2次元 $t t' U$ ハバード模型において、面間の電子のホッピング効果を変分クラスター法(VCA)によって数値的に取り扱った。その結果、以下に述べるいくつかの知見が得られた。

本論文は英文で5章よりなる。まず第1章は序論であり、本研究の研究背景および論文の構成が示された。引き続き第2章では、VCAの基礎となるクラスター摂動論と自己エネルギー汎関数法のレビューが行われた後、VCAの手法およびこれまでに行われた応用例に関して説明が行われた。VCAでは、クラスター内の短距離相関については、厳密対角化によって厳密に取り扱われる一方、クラスターをまたぐサイトの相関については補助場を用いて近似的に取り入れられる。この章では、短距離で強い幾何学的フラストレーションがある系で、電子相関効果をある程度VCAによって取り込むことができることが強調された。

第3章では、本論文の出発点となる2次元 $t t' U$ ハバード模型の絶対零度・半電子充填密度(half-filling)の電子状態に関して、先行する理論研究で得られている結果のレビューが行われた。特にオンサイト相互作用 U がある程度大きく、フラストレーションが強い領域で現れる磁気秩序を持たないモット絶縁体相についての結果がまとめられた。他の数値計算手法に比べ、VCAは磁気秩序のないモット絶縁体相を比較的少ない計算量で取り扱えることが利点であることが指摘された。その一方で、ゴールドストーンモードなどの長距離相関はVCAで十分取り込むことはできず、またクラスターサイズ依存性にも注意を払う必要がある。これらの点を踏まえた上で、VCAにより t が小さい領域でのチェッカーボード型反磁性秩序と、 t が大きい領域でのストライプ型反強磁性秩序の間に、磁気秩序を伴わないモット絶縁体相が得られるという先行研究の結果が説明された。

第4章で本論文の主要な結果が述べられた。2次元 $t t' U$ ハバード模型に面間ホッピ

ング t_{\perp} を加えた 3 次元ハバード模型について説明がなされたのち、この系に対する VCA の手法が述べられた。3 次元系での計算ではクラスターサイズを大きくとることができないため、面に垂直な方向についてはスーパーセルを用意し、計算量を減らす工夫がなされた。まず VCA による計算精度を確認するために、ハートリー-フォック(HF) 近似との比較が行われた。VCA は、小さい U に対しては HF 近似に近いエネルギーを与えるが U が大きくなるにつれて VCA の方がより低い基底エネルギーを与えること、 t_{\perp} を大きくして高次元性が強くなると HF 近似の基底エネルギーに近づくことなどが数値的に示された。また比較できる範囲内で、変分モンテカルロ法および補助場モンテカルロ法による基底エネルギーとの比較を行い、興味あるパラメータ領域ではこれらの手法の基底エネルギーに近い基底エネルギーを VCA が与えることが確認された。一方、VCA では長距離相関が取り入れられていないことを反映し、反強磁性秩序相内の秩序パラメータの大きさは補助場モンテカルロ法に比べかなり大きい値をとることがわかった。

以上を踏まえ、第 4 章の後半では VCA を用いた基底状態の相図が詳しく調べられた。まず電子間相互作用を $U=10t$ に固定し、基底状態のエネルギーを比較することで、 t' と t_{\perp} についての相図が得られた。その結果、 $t_{\perp}=0$ で得られていた磁気秩序のないモット絶縁体相は、 t_{\perp} が大きくなるにつれて抑制され、およそ $t_{\perp}=0.4t$ で完全に消失することが示された。またチェッカーボード(ストライプ)型の反強磁性秩序相からモット絶縁体相への相転移は二次(一次)転移であることも明確に示された。これらの結果が本研究の主要な結論となっている。これはハイゼンベルク模型に対する近似計算に基づく先行研究の結果とよく一致する一方、ハバード模型からのアプローチによる研究として意義あるものと認められる。二重占有率の U 依存性や秩序パラメータについての結果も詳細に示された。第 5 章では結果のまとめと今後の課題が述べられた。

以上、各章の紹介と共に本論文で得られた知見を解説した。本論文はフラストレーションの強い 3 次元強相関係にアプローチした数少ない研究の一つとして意義あるものと認められる。VCA で得られる磁気秩序のないモット絶縁体相の物理的描像や計算精度については注意を要し、さらなる研究が必要と考えられるが、今後の研究の第一歩として基礎物理学への十分な貢献が認められる。従って審査員全員が学位論文として十分なレベルにあり、博士(理学)の学位を授与できると判断した。なお、第 4 章の内容は *Physical Review B* 誌で公表されている。この論文では、第一著者である論文提出者が主体となって計算および結果の解釈を行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断される。またこの件に関して、共同研究者の小形正男氏から同意承諾書が提出されている。