

# 論文審査の結果の要旨

氏名 桐野 俊 輔

本論文で桐野氏は、ある種の電位差をかけたときの強相関電子系の非平衡定常状態を数値的に研究しました。計算手法として、時間依存密度行列繰込群に基づいて非平衡定常状態を調べる新しい手順を開発しました。単一量子ドット系で手法の詳細を確立し、二重量子ドット系、ハバード模型、近藤格子系を解析しました。

非平衡定常状態は、いかに定義・解析するかが統計物理学分野で興味を集めています。また、強相関系の非平衡定常状態は、電流電圧特性の測定実験との対応など物性理論分野で大きな話題です。そのような状況の中、ある種の電位差による非平衡定常状態と電流電圧特性を解析する一般的な手順を確立したのが本論文の最も大きな成果です。

本論文は本文6章と補遺2章からなります。第1章の問題提起のあと、第2章では単一量子ドット系を例として数値計算手法を説明しています。電位差ゼロで有限系を平衡化した上で、ドットの左側全体と右側全体に異なる電位をそれぞれ一様にかけます。その後に電子が移動する時間発展を、時間依存密度行列繰込群を使って追います。(補遺Aで時間依存密度行列繰込群が概観されています。)すると初期の非平衡緩和に続き、電流が定常的となる状況が現れ、最後に系の有限性が顔を出します。そこで中間の定常的状況を非平衡定常状態とみなし、その時の電流を定常電流とします。この計算を繰り返すことによって電流電圧特性を得ます。以降、この手順を二重量子ドット系、ハバード模型、近藤格子系に適用し、それぞれで電流電圧特性などを得ました。

第3章では、直列二重量子ドット系の解析を報告しています。2つの量子ドットが直列に並んでいるため、(i) 左側ドットと左側導線の間、右側ドットと右側導線の間それぞれで近藤シングレットを組む状態、(ii) 左右ドットのスピンのままシングレットを組む状態、(iii) 左右ドットの軌道が結合・反結合状態を形成した上で、結合状態にシングレットが組まれる状態、の3つが考えられます。この系はこれまで主に近似計算で扱われており、直接的数値計算はほとんどありま

せんでした。それに対して本論文では、様々なパラメータ領域で電流電圧特性、微分コンダクタンス、結合軌道占有率、ドット間スピン相関を計算しました。それを基に、コンダクタンスのピークを境に(i)と(ii)-(iii)の間のクロスオーバーが起こることや、ピーク位置がパラメータによって移動する様子が結合・反結合軌道の形成に対応していることを議論しました。

第4章ではハバード模型の解析を報告しています。特にモット絶縁体の絶縁破壊を、バンド絶縁体の絶縁破壊と比較しています。両絶縁体とも、電位差がギャップを超えたところで電流が流れ始めることを示しました。なお、岡らによって、系全体に一様に電位差をかけた場合にはギャップの2乗に比例する閾値で絶縁破壊が起こることが示されていますが、本論文では電位差のかけ方が異なるために異なる結果が得られたと考えられます。(電位差のかけ方による結果の違いについて補遺Bで議論しています。) 閾値より上の電位差では、モット絶縁体の電流がバンド絶縁体より抑制されること、また電位差を閾値でスケールしたときの電流のスケール関数がクーロン相互作用パラメータに依存しないことも示しました。

第5章では近藤格子系を表す周期的アンダーソン模型の解析を報告しています。この系の非平衡状態についてはこれまでに数値計算がほとんどありません。ここでは特に電流電圧特性のスケール関数に注目しています。絶縁破壊の電位差閾値が、モット絶縁体やバンド絶縁体と同じようにギャップに比例することを示しました。しかし、閾値以上での電流のスケール関数がパラメータに依存している点が第4章の結果と異なっています。電流がクーロン相互作用と共に抑制され、 $f$ 電子系へのホッピングと共に増大する傾向を示しました。最後に第6章では全ての結果がまとめられています。

このように本論文では、様々な模型に対して一般的に非平衡定常状態を求める手順を確立しており、その成果は統計物理学や物性理論に対するオリジナルかつ重要な寄与と評価できます。またその結果は、電位差のかけ方は限定的ながら、強相関電子系における絶縁破壊に対して新しい示唆を与えています。なお、本論文は上田和夫氏・藤井達也氏との共同研究に基づきますが、桐野氏が主体となって研究を進めたものであり、寄与が十分であると判断します。

以上により、論文提出者の桐野俊輔氏に博士(理学)の学位を授与できると認めます。