

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 諏訪 秀磨

物性物理学・物質科学において、フラストレート量子スピン系は新奇な量子相や相転移が生じ得る物理系としてたいへん興味深く、実験的にも理論的にも国内外で精力的に研究が行われている。そのようなスピンプラストレーションの起源の一つとして、スピン・格子相互作用が挙げられる。本論文は、新しく効率的な計算科学的手法を開発することで、量子スピン・フォノン複合系の詳細な解析を可能とし、実効的にフラストレートする量子スピン系の基底状態と臨界現象を明らかにしたものである。

第一章は緒言であり、代表的なスピン格子複合系であるスピンパイエルス系の先行研究と未解決の問題が述べられている。先行研究として、スピンと格子自由度のエネルギースケールが大きく異なる場合に対応する、断熱極限と非断熱極限の理論の間の相違点が説明されている。そして、現実物質に対応するような、両極限をつなぐクロスオーバーの解析と、理論研究の主な対象であった次元鎖を超えた解析の必要性が述べられている。しかし、そのように複雑な系の解析はこれまで困難であった。この序章の中で、その困難と、本論文で行われた手法開発がなぜ必要だったのかが説明されている。

第二章では、本論文で用いたマルコフ連鎖モンテカルロ法において、計算効率を大幅に改善する一般的な改良法が提案されている。まず既存のアルゴリズムが紹介された後、モンテカルロ法における棄却確率を最小化することの重要性が述べられている。主要なアイデアは、これまで代数的に解かれていた確率決定問題を、幾何学的な「重みの割り当て」問題として視覚的に表現することである。この新しい表現を用いて、半世紀以上使われ続けてきた「詳細つりあい条件」を課さずとも、正しい遷移確率を構成できることが示された。またいくつかの物理的模型において、この改良により計算効率が数倍から100倍以上改善できることが確認されている。

第三章では、まずスピンパイエルス系に対してモンテカルロ法を用いる際のこれまでの困難が説明されている。スピンと相互作用するフォノンは、ハミルトニアンにより粒子数が保存しないボゾンとして表現されるが、経路積分量子モンテカルロ法で現在最も汎用性のあるワームアルゴリズムを用いても、そのような非保存粒子を扱うことはできなかった。本章では、スピンパイエルス系のような粒子数非保存系に対しても効率的な新しい状態更新法が提案されている。またグリーン関数などの非自明な相関関数の計算法についても詳細に述べられている。

第四章では、通常有限サイズスケールリング法が有効でない Kosterlitz-Thouless 転移に対して強力な解析法であるレベルスペクトロスコピーを、モンテカルロ法と組み合わせて用いる新しい数値解析手法が提案されている。この手法は、1次元のスピンパイエルス系などの量子相転移の解析に特に有効である。この手法の鍵はエネルギーギャップの精密測定にあるが、従来のモンテカルロ法では統計誤差のみでなく標準誤差も含まれていたため、詳細な解析は困難であった。本章では、標準誤差を系統的に小さくする新しい統計量が提案され、その有効性が示されている。さらに、ボンド交替鎖に対してエネルギー

ギャップの交差を測定することで、小さな系の計算から非常に効率良く転移点を求めることができることが実証されている。

第五章では、上記の手法を用いて1次元XXZ スピンパイエルス系の基底状態相図が明らかにされた。レベルスペクトロスコピーを用いることによって、相転移の臨界指数とユニバーサリティークラスが高精度で求められている。さらに、断熱領域のパラメータであっても、非断熱極限の有効モデルであるフラストレートスピンモデルと定性的に相図が一致することから、非断熱極限から断熱極限まで相図は連続的に繋がっていることが結論された。またこのクロスオーバー領域に対する詳細な解析から、以前の繰り込み群の解析とは定性的にも異なる結果を導いた。

第六章では、1次元鎖を超えたモデルとして、スピンパイエルス鎖を格子相互作用で繋げた系の基底状態の解析がなされている。量子モンテカルロシミュレーションと有効モデルにおける臨界次元の解析から、鎖間相互作用にフラストレーションがない場合は無限小の鎖間相互作用により基底状態でダイマー秩序が生じると予想された。一方、鎖間の相互作用に強いフラストレーションがある場合、系は2次元の量子的液体状態から、マクロスコピックに縮退したダイマー状態へ相転移すると予想された。これはフラストレートした2次元系が動的に1次元的な励起を持つことに起因すると考えられ、有効相互作用の見積もりや他のモデルとの比較から結果の妥当性が議論された。

第七章は本論文の結言であり、新たに開発された数値手法を用いることにより、実効的にフラストレートする量子スピン系に関する詳細な解析がはじめて可能となった点が強調された。本論文は、これまで負符号問題によりモンテカルロ法が適用できなかったモデルに対する一つの非常に有望な解析法を提案し、またそれを用いて、1次元・2次元のスピンパイエルス系における詳細な相図と新奇な臨界現象を明らかにしたという点で大きなインパクトがあり、高く評価される。さらに、本論文で提案された計算科学的手法は、非常に一般的なものであり、今後、物性物理分野だけでなく他の分野にも広く波及すると期待される。

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。