

## 審査の結果の要旨

氏名 吉竹 純基

吉竹純基氏が提出した博士論文は、「Spin dynamics at finite temperatures in the Kitaev model (Kitaev模型における有限温度スピンドYNAMICS)」というタイトルで、英文で執筆されており、全7章からなる。

量子スピン液体と呼ばれる奇妙な量子状態の解明は、物性物理学における基本的で重要な未解決問題の一つである。量子スピン液体とは、強い量子ゆらぎのために絶対零度まで磁気秩序が安定化せず、スピンの揺らいだまにある状態である。1973年のP. W. Andersonによる理論的な提案以降、実験・理論ともに精力的な研究が行われてきたが、その全貌は解明されていない。近年になって、Kitaev模型と呼ばれる可解模型の提案を皮切りに、理論と実験の両面からの世界的な研究の一大潮流が巻き起こっている。ここでは、理論と実験の比較研究を通じた量子スピン液体の同定が大きな課題とされている。Kitaev模型におけるスピン励起は、遍歴的なマヨラナフェルミオンと局在したフラックスという2種類の異なる励起に分裂する。これらの痕跡を候補物質において実験的に捉えようという努力が行われているが、実験的に重要となるスピンドYNAMICSの温度・エネルギー依存性に関して、信頼できる理論結果が存在しないことが大きな問題であった。本論文では、Kitaev模型の有限温度におけるスピンドYNAMICSを解明する新しい数値計算手法を開発し、それらを適用することで、実験的に重要な物理量を定量的に評価し、それらの結果を実験結果と比較することで、Kitaev量子スピン液体の解明に大きく貢献することに成功した。

第1章では、Kitaev模型とその厳密解、スピンの分数化について簡単に紹介している。最近の理論と実験の展開を概観し、本研究の研究動機を述べている。第2章では、Kitaev模型に対するマヨラナフェルミオン表示について述べている。

第3章では、本研究で新しく開発した数値計算手法について論じている。従来のマヨラナフェルミオン表示を用いた量子モンテカルロ法の概略を紹介したのち、ここで新しく開発したクラスター動的平均場近似と、連続時間量子モンテカルロ法の詳細を示している。また、最大エントロピー法の概略と、計算する物理量の導入も行なっている。

第4章では、マヨラナフェルミオン表示を用いたクラスター動的平均場近似と連続時間量子モンテカルロ法を組み合わせることで得られた結果を示している。具体的には、

非弾性中性子散乱実験において重要となる動的スピン構造因子、核磁気共鳴実験におけるスピン格子緩和率、および磁化率の温度依存性を示している。これらの物理量の温度やエネルギー依存性に、スピンの分数化を強く反映した特徴的な振る舞いが現れることを明らかにしている。とりわけ、動的スピン構造因子において、遍歴的なマヨラナフェルミオンを強く反映した高エネルギー励起の高温からの発達と、局在したフラックス励起を強く反映した準弾性的な励起の低温へ向けた発達は重要な知見である。また、スピン格子緩和率の結果からは、動的なスピン相関が静的なスピン相関とは全く異なる温度依存性を示すという、スピンが分数化したKitaev量子スピン液体に特有の興味深い性質が明らかにされている。

第5章では、マヨラナフェルミオン表示を用いた量子モンテカルロ法と連続時間量子モンテカルロ法を組み合わせることで得られた結果を示している。この手法では、前章では到達できなかった極低温を含めた広い温度範囲での計算が可能となっている。これにより、動的スピン構造因子やスピン格子緩和率において、フラックス励起ギャップを反映した低温での振る舞いが明らかにされている。また、3次元格子上で定義されたKitaev模型に対する計算も行われ、3次元系に特有の常磁性—スピン液体相転移にまつわる特異的な温度依存性が明らかにされている。

第6章では、本研究で得られた理論結果を、他の理論研究や実験結果と比較検討している。理論研究との比較では、古典系との比較を通じて、量子スピン液体特有の性質を論じている。また、量子系に対する他の計算結果との比較を通じて、本研究結果の妥当性も検討している。実験研究との比較においては、非弾性中性子散乱実験の結果との良い一致について論じている。また、核磁気共鳴実験については、磁場中の実験結果について、本研究の結果との良い一致について論じている。

第7章では、本研究の成果に関する総括と、今後の展望が示されている。

以上をまとめると、本論文では、量子スピン液体研究において現在世界的に精力的な研究が進められているKitaev模型をとりあげ、これまで計算が困難であった有限温度におけるスピンダイナミクスを計算する新しい数値計算手法を開発し、それらを適用することで、実験との定量的な比較に資する結果を得ることに成功した。本研究の結果は、理論と実験を両輪とした量子スピン液体研究の新たな展開に大きく貢献した点で、基礎物理学的な側面だけでなく、量子スピン液体における分数励起を用いた量子計算という応用を見据えた点においても重要な成果として、物性科学・物理工学の発展に大きく寄与すると期待される。以上より、本論文審査委員会において審査員全員一致で、本論文が博士（工学）の学位論文として合格であると判定された。

なお本論文は他の研究者との共同研究の成果を含むが、論文提出者が主体となって進めた計算と解析からなり、その寄与が学位授与に当たって十分であることが認められた。