

論文審査の結果の要旨

氏名 溝口知成

本論文は 10 章および付録 A, B, C, D, E, F からなる。本論文は第 2 章から第 5 章を第 I 部、第 6 章から第 10 章を第 II 部として構成されている

第 1 章は、序論であり、本研究で展開されるフラストレートしたスピン系の研究とカゴメ格子およびハイパーカゴメ格子に関する研究テーマが紹介されているの概要が述べられている。

第 I 部（第 2 章から第 5 章）ではハイパーカゴメ格子をもつイリジウム(Ir)酸化物の一般的なスピン模型と基底状態が議論されている。第 2 章は、第 I 部のイントロダクションで d 電子系でのスピン軌道相互作用と電子関の協奏、イリジウム酸化物のローカルな電子状態、様々なイリジウム酸化物、ハイパーカゴメ格子を持つイリジウム酸化物、関連する実験・理論的研究のまとめ、第 I 部の研究の目的と概要を紹介している。第 3 章ではハイパーカゴメ格子の構造と対称性に関して、結晶構造、C3 回転対称性、Ir サイト周りの C2 回転対称性、ボンド・サイトの分類を行い、一般の電子系のハミルトニアンから強結合展開を用い、特に正八面体にひずみがない場合の単純化された有効スピン模型の導出を行っている。第 4 章では、前章で得られたハミルトニアンで表される古典スピン模型の基底状態相図をいろいろなパラメータに対して Luttinger-Tisza 法、Simulated annealing 法を用いて決定しこの系の示す基底状態の全体的な描像を得ている。さらに、実験との対応やスピングルージングの現象論的解析を行っている第 5 章は、第 I 部のまとめと展望に当てられている。

第 II 部（第 6 章から第 10 章）ではカゴメ格子上の古典スピン液体状態における基底状態を個別三角形におけるスピン配位を分数電荷という表記法を用い、その間の相互作用という観点から議論している。第 6 章は第二部のイントロダクションであり、古典スピンアイスとモノポールなど関連現象や、そこでの古典スピン系における分数励起の考え方を説明し、第二部での研究の目的と概要を説明している。第 7 章ではカゴメ格子上の最近接、次近接、次々近接相互作用をもつイジング模型と、本論文で議論される状態の電荷表示を説明している。電荷表示に基づく基底状態の解析や基底状態相図の相境界の導出を行っている。第 8 章では有限温度における相の同定を古典モンテカルロ法を用いて行い、状態の拘束条件による状態更新の困難を克服するため新しいアルゴリズムの開発

も行っている。また、第9章では、得られた比熱・エントロピー・磁化率、Binder Plot、などの解析を行い、さらに臨界現象に対して有限サイズスケーリング解析を行っている。また、Husimi tree 上の Bethe 近似によって解析し秩序形成の描像を明らかにしている。さらに、本研究で明らかにされた新しいスピン液体相では静的磁気構造因子に特有の構造が現れることを発見している。

第10章では第2部のまとめと展望が与えられている。さらに、付録として計算の方法の詳細が与えられている。付録A: Luttinger-Tisza 法による厳密解の導出、付録B: $q = 0$ の磁気秩序相の静的磁気構造因子、付録C: $q = 0$ の磁気秩序相のスピンスカラーカイラリティ、付録D: 有限サイズスケーリングと転移温度の決定、付録E: 自己相関関数の計算による新しい worm algorithm の緩和の評価、付録F: 電荷密度の温度依存性。

これらの成果は、カゴメ格子関連のフラストレーションをもつスピン系の秩序形態に関して新しい知見を明らかにし、関連する競合相互作用磁性体の特徴に関する理論構築を与え、この分野の新しい方法論を拓くものである。本研究は、縮退が大きなフラストレート系の物性物理学の新しい展開を与えるものと評価できる。

なお、第I部は Kyusung Wwang 氏、Eric Kin-Ho Lee 氏、Yong Baek Kim 氏との共同研究であり、第I部は宇田川将文氏、Ludovic D. C. Jaubert 氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって研究推進したものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。