

# 審査の結果の要旨

氏名 竹中 光

本論文では、量子力学に基づく電子状態計算データから、有効な古典スピンモデルをベイズ推論によって自動的に抽出する枠組みを構築しており、遷移金属化合物  $\text{NiGa}_2\text{S}_4$  三角格子系を対象としている。第2章では、Ni16 サイト系における全てのイジングスピン配列に対する非制限ハートリー・フォック計算データを用いてモデル選択を行った結果を示している。第3章では、スピン配列がボルツマン分布に従うという事前知識を導入した結果を示している。第4章では、マルコフ連鎖モンテカルロ法を導入した手法の提案を行っている。

第2章では、古典スピンモデルにおいて、電子スピン間の距離や多体効果等に応じて無限に分類されうる交換相互作用パラメータの中で、どれが実効的で、モデルに入れるべきパラメータであるかを評価するための客観的な指標を確立することに取り組んでいる。推定には Ni16 サイト系における全てのスピン配列についての非制限ハートリー・フォック計算データを用いることにより、データの選び方に恣意性を含ませることなく有効モデルを選択している。その結果、これまで支配的であることが知られていた第三近接の交換相互作用だけでなく、値が小さいとされていた最近接交換相互作用、及び磁性実験では考慮されなかった第二近接交換相互作用もモデルに考慮すべきパラメータであることが推定されている。そして各交換相互作用パラメータの値を求めた結果、反強磁性的な第三近接の交換相互作用の大きさが、最近接、第二近接の交換相互作用と比較して大きい値になることが確認されている。

第3章では、第2章の枠組みのさらなる拡張として、温度を導入した解析手法を提案している。第2章では全てのスピン配列を等価に重みづけして計算を行っていたが、これは全状態が無秩序に入り混じった常磁性状態がみられるような高温極限で計算を行っていることに対応している。しかし、磁性実験では低温で計測を行っているため、温度が異なる状況下で結果を比較していることになる。そこで第3章では、第2章の枠組みに温度を導入することにより、実験に近い描像を表現した有効モデル選択の手法を提案・実装している。その結果、最近接の交換相互作用が正の値となることが推定され、磁性実験と定性的に一致する結果を得ることに成功している。

第4章では、第2章と第3章で構築した枠組みについて、計算量爆発が起こるような系でも適用可能にする手法について述べている。第3章まではスピンの自由度を2(↑スピンと↓スピン)に制限していたが、本論文で扱う  $\text{NiGa}_2\text{S}_4$  三角格子系においてはフラストレーションによって非共線方向のスピンが秩序の形成に関わる可能性があるため、スピンの自由度を大きくした計算も必要になることが予想される。ただしスピンの自由度

を大きくすると、スピン配列の場合の数が指数関数的に増加するため、第3章までのようにすべてのスピン配列について計算を行うことが困難になる。そこで第4章では、交換モンテカルロ法と呼ばれるサンプリング手法を用いることにより、全状態についての計算を行うことなく有効モデルを抽出することに取り組んでいる。また、多次元マルチヒストグラム法を用いることによって、さらに効率的なモデル選択を行うことができることを示している。その結果、自由度が大きな系でも、磁性実験と一致するモデル選択結果が得られることが確認されている。

以上のように、本論文は、これまで経験的に行われてきた古典スピンモデルの設計を、より系統的に行うことができる手法を構築することに成功している。さらに、この手法は、本論文で扱った系だけでなく、他の物質、格子系、モデルへ適用可能であり、様々な物性の有効モデルを選択するアルゴリズムへと拡張できることが期待される。本論文で構築された手法は数値計算データを対象としていたが、実験データにも同様に適用できる可能性が示されており、実験計測と数値計算のより系統的な比較を行うための手法としても有用であることがわかる。また、物性物理学に限らず、有効モデルを設計して実験計測データや数値計算データの解釈をするという構図は様々な学問分野で見られるため、本手法は分野横断的な枠組みとして広く用いられることが期待される。

なお、本論文は、永田賢二、溝川貴司、岡田真人との共同研究であるが、論文提出者が主体となって解析及び検証を行ったもので、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（科学）の学位を授与できると認める。

以上 1841 字