

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 金子隆威

量子液体と呼ばれるものにはフェルミ液体、朝永ラッティンジャー液体など数種が知られている。その中で、電子が電子相関効果のためにモット絶縁体となり、電荷自由度が固体化したのちに、スピン自由度のみが明らかな対称性の破れを示さずに、量子液体状態にとどまる可能性が、アンダーソンによって、三角格子上の量子スピン系に対して共鳴原子価状態として提唱された。これ以来、幾何学的なフラストレーション効果のために磁気秩序を示さない「量子スピン液体」が実現しうる可能性が40年にわたってさまざまに追究されてきた。実験的にもモット絶縁体となる有機導体や、基板上の2次元ヘリウム3の系に対して量子スピン液体が実現している可能性が指摘されてきた。しかし量子スピン液体の本性はまだ未知の部分が多い。

本論文は三角格子状の格子構造を持つ2つの系、すなわち量子ハイゼンベルク模型と、遍歴的な電子系を表わすハバード模型に対して、基底状態が量子スピン液体となる可能性を追究したもので、英文で7章および2つの付録からなる。

構成は、導入部に続いて、第2章において本論文で採用している数値計算手法である多変数変分モンテカルロ法の波動関数の構成法と、変分パラメタの最適化によって高精度の基底状態波動関数を得る手法が、紹介されている。引き続いて第3章で、この手法を1次元ハバード模型に適用し、スピンや電荷の相関関数の長距離での減衰の漸近的なふるまいを求めた結果、この手法が高精度で、共形場理論などによって既に知られている朝永ラッティンジャー液体の臨界指数をよく再現することに成功したことが述べられている。第4章ではこの手法を次近接交換相互作用を含む、三角格子上の量子ハイゼンベルク模型に適用し、次近接交換相互作用と最近接交換相互作用の比が0.1付近の有限の幅の領域に、磁気秩序を示さない領域が存在することを発見した。この相は量子スピン液体相と解釈でき、隣り合うスピンの角度となって秩序化する反強磁性秩序(120度反強磁性)とストライプ型の反強磁性秩序に挟まれて出現する。このスピン液体相の励起状態の構造を調べた結果、その励起エネルギーの運動量依存性およびシステムサイズ依存性の詳細な解析から、三重項励起および一重項励起にギャップを持たない、ギャップレスなスピン液体であることを見出した。さらに18×18までのサイズの計算から、調べ得る運動量のすべてで、最低の励起エネルギーが交換相互作用 J の0.1以下と推定されるという結果を得た。これは通常磁気秩序状態で、各運動量で最低のエネルギーを持つ三重項励起がスピン波励起に対応し、このうちの最大のものが、 J 程度であることと顕著な違いを示し、本論文で発見したスピン液体が縮退の大きなスピン液体という性格を持つことを明らかにしている。また第5章では三角格子上の最近接と次近接のホッピングを持つハバード模型を考察している。この模型の基底状態に金属相、120度反強磁性、ストライプ型反強磁性に挟まれて、磁気秩序を持たないと考えられる量子スピン液体と up-up-down-down 構造と呼ばれる長周期の磁気秩序があると推定される状態がきわめて近いエネルギーで競合していることを、考察できたシステムサイズの範囲で見出した。さらに励起スペクトルの運動量依存性も考察した結果、この二つの競合する状態が良く似た特徴を持つことも見出した。共通点はともに運動量ゼロの三重項の励起がギャップを持つことと、ブリリアンゾーンで1次元上のライン上とこれに等価な120度で交差する2本のライン上でともにギャップがゼロであることが、有限サイズの結

果の外挿から推定されるという前例のない励起構造であることである。また up-up-down-down 構造の磁気秩序相の秩序磁気モーメントがゼロでないとしても、隣接する120度反強磁性やストライプ秩序と比べても顕著に小さいことを示した。これをもとに第6章の議論において、十分大きな系での計算が行なえれば、量子スピン液体と up-up-down-down 磁気秩序と一応同定された相が、有限サイズでの限界のために、実際は同じ量子スピン液体の異なる現れを見ている可能性があるかどうかを考察し、その可能性があることを指摘した。またハイゼンベルク模型で見出したスピン液体は大きなスピノンのフェルミ面を持つスピン液体という理論的提案と計算で得られた範囲で矛盾がないことを示した。第7章は全体のまとめと今後の展望である。

以上、金子隆威提出の本論文は、量子スピン液体の候補を現在望みうる最大規模で最高の精度の変分モンテカルロ計算によって、2つ発見し、その励起構造の詳細な追究から、今まで知られていなかったスピン液体が存在する可能性を指摘したものである。スピン液体の解明という物性物理学の重要な課題に対して問題提起と顕著な貢献をしたものと認められ物理学および理工学への寄与は大きい。以上議論した結果、本論文審査委員会は全員一致で本研究が博士(工学)の学位論文として合格であると判定した。

なお本論文は物性研究所森田悟史氏、および指導教員今田正俊との共同研究の部分があるが、論文提出者が主体となった計算、解析において、論文提出者の寄与が、学位授与に当たって十分であることが認められた。