審査の結果の要旨

論文提出者氏名　　本山 裕一

低次元反強磁性量子スピン系は量子効果の強く効く基本的な物理系であり、その基底状態や量子相転移は理論的にも実験的にも精力的に研究されている。これらの基底状態は強い量子効果により、古典系で対応するもののないトポロジカル秩序変数と呼ばれるもので特徴付けられる。本論文は、トポロジカル秩序変数のひとつである局所離散化ベリー位相を計算するための量子モンテカルロ法を開発し、低次元量子スピン系の新たなる定量的な解析手法を提案したものである。

第一章は緒言であり、低次元量子スピン系の数値研究における本研究の位置づけが示されている。

第二章では、量子スピン系の基底状態を記述するヴァレンスボンド描像や、従来のトポロジカル秩序変数の説明の後、局所離散化ベリー位相と量子効果のより強い模型である SU(N)ハイゼンベルグ模型の導入が行われている。

第三章では、モンテカルロ法のレビューである。マルコフ連鎖モンテカルロ法、量子モンテカルロ法、ループアルゴリズム、リウェイティング法、ワン・ランダウ法、そして今回複素数問題を軽減・解決するために用いられたメロンクラスターアルゴリズムに至るまで、詳細に解説されている。

第四章では、本論文において開発された、局所離散化ベリー位相の量子モンテカルロ計算手法が述べられている。ここではまず、2 つのハミルトニアンの基底状態波動関数の内積について、微小パラメータに関して級数展開した時の係数を、量子モンテカルロ法により計算する方法が非常に一般的に示されている。この手法のポイントは、基底状態を適当な状態からの射影で表すという操作が経路積分モンテカルロ法における微視的配位である世界線の重み付き和として表されることと、状態の規格化因子がそのまま確率の規格化因子に対応していることである。1 次の係数がベリー接続になっていることと、2 次の係数からは相転移を捉える別の物理量であるベリー曲率やフィデリティー感受率が導けることが述べられている。ベリー位相の計算をするためには、一般に複素数問題が発生し、統計誤差が増大してしまうが、反強磁性スピン系における重みの位相の improved estimator を導入することで、この複素数問題がメロンクラスターアルゴリズムで低減・解決されることが述べられている。さらに、ベリー位相を定義するための摂動の入れ方を工夫することで複素数問題が発生しなくなること、そのような入れ方を探すための視覚的な手法が示された。最後に、スピン系におけるベリー接続とベリー曲率の関係から、ベリー接続の有限サイズスケーリングの式が議論されている。

第五章から第七章では、具体的な系への応用が示されている。まず第五章では、一次元ボンド交代梯子格子上の反強磁性ハイゼンベルグ模型の計算がなされた。メロンクラスターアルゴリズムを用いることで厳密対角化では行えないようなサイズまで計算が行われ、転移点の推定値は、他の手法で得られたものとよく一致している。さらに、有限サイズスケーリング解析から、相関

長の臨界指数も得られている。

第六章は二量体化正方格子反強磁性ハイゼンベルグ模型における計算結果である。ネール相とダイマー相との、エネルギーギャップのシステムサイズ依存性の違いから、ネール相とダイマー相を区別することができること、さらにモンテカルロ法で求めたベリー位相のグラフが、サイズを変えると転移点で交わることが示されている。

第七章では、SU(N)ハイゼンベルグ模型におけるダイマー状態が Z_N ベリー位相で特徴付けられることが述べられ、量子モンテカルロ法での計算方法が示された。正方格子における基底状態の N 依存性をベリー位相によって調べた結果が示されている。次に四体相互作用が導入された SU(3) J-Q モデルのネール・VBS 相転移に関して議論が行われ、先行研究と矛盾しない転移点が得られ、さらにはこの転移が脱閉じ込め転移であることが示唆されている。最後に、ボンド交代鎖上の SU(N) M カラム模型のベリー位相が計算され、Z_N ベリー位相が実際に N 通りの値を取ることが示され、N と M とが大きい模型はより豊富な相図を持ちうると結論づけられた。

第八章は結言である。

本論文は、ベリー接続やベリー位相、さらにはベリー曲率やフィデリティー感受率といった今まで量子モンテカルロ計算が極めて困難であった「波動関数の位相」に関する量の計算法を定式化・一般化した点で大きなインパクトがあり、さらに、実際それを用いて二次元スピン系のトポロジカル秩序変数の大規模計算を行い、ヴァレンスボンドの直接観測に初めて成功したという点でも学術的に高く評価される。なお、本論文の内容は、指導教員(藤堂)との共同研究であるが、手法の開発、シミュレーションの実行、解析などに関して、論文提出者本人の寄与が主であると判断される。

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。