

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 栗田 萌

トポロジカルな効果と電子相関が絡み合う現象を記述する物理や機構を解き明かす研究は、数年前に開けてきた分野であるが、基礎科学のおよび将来の応用の可能性をほらむ観点で、精度の高い計算で数値的に解明する研究も含めて急速に進展している。

本論文はスピン軌道相互作用あるいは電子相関によって、系がトポロジカルに顕著な性質を示す場合に、有効な数値手法を開発するとともに、その数値手法を用いて電子相関が引き起こすトポロジカル絶縁体の可能性を追究したもので、英文で4章からなる。

構成は、1章の導入部に続いて、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、論文提出者が行なった手法の拡張について述べている。手法の拡張の中には一体部分の変分パラメタを複素数化するとともに、記述できる波動関数の全スピンを任意にとれるようにすることで、スピン軌道相互作用の顕著な系やトポロジカルな効果を扱うことができるようにしたことを含んでいる。

この拡張の有効性を示すために、スピン軌道相互作用の顕著なイリジウム酸化物の有効モデルとしても提案され、トポロジカルなスピン液体状態を基底状態に持つことが厳密に知られている、ハニカム構造を持つキタエフモデルに適用した例を述べている。全運動量の量子数をゼロに射影する射影演算子を組み込んだり、あるいは保存量として知られる、ハニカム構造の単位である単位六角形内で定義される渦演算子の量子数について射影する演算子を変分モンテカルロ法に組み込むことによって、大変高精度な波動関数が得られ、エネルギーが0.1%程度あるいはそれ以下の誤差に収まることが示されている。さらにウィルソンループとよばれる保存量への射影によって、基底状態の縮退度を正確に求めることができることも示された。

またハニカム格子上のハバードモデルで、相互作用 U を増やしていくときに生じる半金属-反強磁性絶縁体間の相転移についても、その臨界点および臨界指数が、平均場近似と異なり、現在最も高精度な方法として知られる量子モンテカルロ法の結果と概ね一致することが示されている。量子モンテカルロ法はスピン軌道相互作用の顕著な系に対しては適用範囲がほとんどないが、変分モンテカルロ法は基本的にはどんな場合にも使える手法であり、この手法の有効性が示された意義は高い。

第3章ではこの手法を適用して、スピン軌道相互作用がないときに、電子相関が創発的に生み出す有効スピン軌道相互作用を原因として、自発的対称性の破れによってトポロジカル絶縁体が生じる可能性を追究している。この問題についてはハニカム格子上の次近接相互作用を考慮することでトポロジカル絶縁体を実現できることが平均場近似による先行研究で主張されていたが、より複雑な構造の電荷秩序状態の可能性も考慮すると、平均場近似の範囲内でもトポロジカル絶縁体が安定化される領域は存在しないことを明らかにしている。その上で、最近接サイト間に限定していたトランスファーを3次近接まで含め、フェルミレベルでディラック型の線形分散を示しているバンド構造から、フェルミ速度を減少させ、2乗分散に近づけることによってトポロジカル絶縁体相が安定化される領域があることを、開発した変分モンテカルロ法を用いて示した。このようなハニカム格子上の2乗に近い分散は2層グラフェンの層間の角度を変化させることで実現できるこ

とが知られており、この系での実現可能性についても言及している。

以上、栗田萌提出の本論文は、変分モンテカルロ法をスピン軌道相互作用と電子相関が共存するときにも使えるように拡張し、電子相関によって生ずるトポジカル絶縁体の実現可能性を高精度で追究するという物性物理学の重要な課題に対して問題提起と貢献をしたものと認められ、物理学および物理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。

なお本論文は山地洋平氏、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。