

博士論文の要旨及び審査結果の要旨

氏名 関 孝一
 学位 博士 (理学)
 学位記番号 新大院博 (理) 第 429 号
 学位授与の日付 平成 30 年 3 月 23 日
 学位授与の要件 学位規則第 4 条第 1 項該当
 博士論文名 イベント連鎖モンテカルロ法を用いた Cuboc 型磁気秩序に対する相転移現象の研究

論文審査委員 主査 教授・大野 義章
 副査 教授・吉森 明
 副査 教授・撰待 力生
 副査 准教授・奥西 巧一

博士論文の要旨

フラストレーションのあるスピン多体系における相転移現象は、統計力学の基本問題として研究されてきた歴史的にも重要な問題である。とくに、典型的な例である積層三角格子の古典反強磁性ハイゼンベルク模型での 120° 構造をもつ平面スピン秩序に対する相転移の解析は、計算機シミュレーションや場の理論の両面から展開され、現代的相転移理論の発展に本質的な寄与を与えてきた。その研究の過程で、 120° 平面秩序だけでなく、3 次元的なスピン秩序を表す立体秩序、さらにはスピンと秩序変数の自由度を拡張した $O(N) \times O(M)$ 型の Landau-Ginzburg-Wilson (LGW) 型の有効場模型へと理論が一般化されており、スピンに加えてカイラリティという隠れた自由度の出現に呼応して、非自明な 2 次転移が実現するのか、弱い 1 次転移にクロスオーバーするのかという興味深い問題が提起されている。しかし、現状において、 $O(N) \times O(M)$ 型 LGW 模型のくりこみ群解析では、その転移が 2 次転移なのか弱い 1 次転移なのか決着できておらず、また、フラストレーションによるシミュレーションの困難性から、定量的な解析も手付かずの状態であった。

本論文では、積層型カゴメ格子ハイゼンベルク模型において実現される Cuboc と呼ばれる新規の立体スピン秩序に着目し、スピン立体秩序の相転移現象の普遍性の検証を行うことを目指している。とくに、イベント連鎖モンテカルロ法という詳細釣り合いを破るアルゴリズムをフラストレーション系に応用することでシミュレーションの困難を克服し、相転移が、2 次転移か弱い 1 次転移か定量的に明らかにすることを目的としている。

まず、1 章のイントロダクションにおいて、古典フラストレーションスピン系とそれらの相転移研究の現状が概説される。とくに積層型三角格子ハイゼンベルク模型に対する計算機シミュレーションや長波長の有効場理論などのこれまでの研究の経緯と意義が説明される。次に、立体スピン秩序や $O(N) \times O(M)$ 型 LGW 模型における相転移を解析する際の問題点を整理し、3 次近接相互作用までを含む積層型カゴメ格子ハイゼンベルク模型における Cuboc 秩序の概略が述べられる。さらに、モンテカルロシミュレーション上での緩和の困難性と弱い 1 次転移におけるサイズ外挿の難しさが指摘されたのち、本研究の目的と物理的な意義が明快に述べられる。

2章では、本論文で取り扱う3次近接相互作用までを含む積層型カゴメ格子ハイゼンベルク模型の具体的な提示があり、相互作用 (J_1, J_2, J_d) の組み合わせにより、スピン空間での対称性は同じだが格子上の配置パターンが異なる Cuboc1, Cuboc2 の二つの秩序変数が存在することが説明され、それぞれの相転移現象解析の上でのポイントが整理される。

3章においては、マルコフ連鎖モンテカルロ法の基礎とイベント連鎖アルゴリズムの解説、および、フラストレーション系に適用する際の注意点が述べられる。とくに、詳細釣り合いを破ることで、擬似的なクラスタースピントリップが可能になり、フラストレーション系でのサンプリングの効率が大幅に改善されることが議論される。

4章ではまず、 J_1 - J_2 および J_1 - J_d ($J_d < 0$) の積層カゴメ系での Cuboc2 への相転移に対する結果が説明される。とくに、システムサイズ $L=72$ までの広いパラメーター領域の計算でエネルギーヒストグラムのダブルピーク構造が確認されたことから、弱い1次転移であると結論付けている。引き続き、5章においては J_1 - J_d ($J_d > 0$) の積層カゴメ系で Cuboc1 への相転移解析の結果、2次転移的な臨界指数が観測されるが、 $L=72$ までの解析で指数自体がパラメーターにより非普遍的な値を示すことが明らかにされる。このため、バルク極限の相転移は弱い1次転移の可能性が高いことを論じている。

6章が本論文の締めくくりであり、結果の意義と今後の展望が簡潔にまとめられている。なお、シミュレーションの方法論や解析手法の詳細が付録で与えられている。

審査結果の要旨

本研究は、統計力学におけるフラストレーション系の相転移現象研究の中でも歴史的に重要な問題である立体スピン秩序への相転移現象を、これまでにない高い信頼性のシミュレーションにより解析し、その転移がカイラル普遍クラスに属する非自明な2次転移なのか、弱い1次転移へのクロスオーバーかを定量的に決定すること、および、対応する $O(N) \times O(M)$ 型 LGW 模型のくりこみ群固定点が正しい相転移を記述できるのかどうかの問題をシミュレーションの立場から定量的に解決することを目的としている。扱った模型は積層型のカゴメ格子反強磁性ハイゼンベルク模型であり、パラメーターによって2種類の Cuboc と呼ばれる興味深い立体スピン秩序を見出されているが、シミュレーション自体がかなり困難な部類に入り、相転移の定量解析はこれまで難しいと考えられていた。本論文では、イベント連鎖モンテカルロ法という最新のシミュレーション技法に独創的な工夫を加えることでシミュレーションの問題点を克服し、高い信頼性で Cuboc 型立体秩序相転移に対して弱い1次転移へという結論を初めて与えることに成功している。また、同じ対称性を持ちながら空間配置のことなる2種類の Cuboc 秩序に対して弱い1次転移であることを確認しているということは、対称性にもとづく場の理論的な研究に対しても重要な示唆を与えており、その意義は歴史的にも重要と考えられるだけでなく、今後の関連研究への波及効果も大きい。以上のことから、本論文の研究成果は、統計力学的なシミュレーションの方法論、および、フラストレーション系における立体秩序の相転移現象にかかわる場の理論の普遍性の検証の両方の観点から、非常に高く評価される。

なお、本論文の主要な研究成果は、査読付き論文1編（英文）で報告されている。また、関連する研究成果が計2報（英文）も査読付き論文として出版済みである。

よって、本論文は博士（理学）の博士論文として十分であると認定した。