



Title	幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系に関する理論的研究
Author(s)	吉岡, 匠哉
Citation	大阪大学, 2009, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/49525">https://hdl.handle.net/11094/49525</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	吉 岡 匠 哉
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 2 2 9 2 2 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 21 年 3 月 24 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科精密科学・応用物理学専攻
学 位 論 文 名	幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系に関する理論的研究
論 文 審 査 委 員	(主査) 准教授 菅 誠一郎 (副査) 教 授 笠井 秀明 教 授 菅原 康弘 招へい教授 川上 則雄 京都大学理学研究科准教授 藤本 聡

## 論 文 内 容 の 要 旨

本論文では、幾何学的フラストレーションを有する格子上の強相関電子系における物性に関して、経路積分繰り込み群法を用いた理論的研究を行った。

第1章では、幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系における物性に関する研究背景について紹介した後、本論文の目的について述べた。

第2章では、本論文で通して用いる理論的手法である経路積分繰り込み群(PIRG)法について説明した。PIRG法は、幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系など、他の数値的計算手法では計算が困難な系にも適用できる強力な枠組みとして提案された。この章では、系統的な計算過程を提案すると共に、新たな反復法を導入することで、従来のアルゴリズムにおけるlocal minimumに捕らわれ易い問題と計算の履歴が結果に影響する問題が克服できることを示した。

第3章では、チェッカーボード格子上half-filled Hubbard模型の基底状態について、第2章で紹介した改良を加えたPIRG法による研究を行なった。Hubbard相互作用の増加により一次の金属絶縁体転移が $U_c/t=6.75 \pm 0.25$ において実現し、ここでは二重占有率において飛びの異常が見られることを示した。さらに、dimerとplaquetteの相関関数について計算を行ない、絶縁体相においてplaquette秩序状態が実現する事を見出した。この章では特に、等方的なチェッカーボード格子模型に注目して、その物性を明らかにした。

第4章では、第3章における研究を発展させ、異方的チェッカーボード格子上half-filled Hubbard模型の基底状態について、改良を加えたPIRG法による研究を行なった。対角方向に沿った飛び移り積分 $t'$ を系統的に変化させて幾何学的フラストレーションの大きさを制御することにより、正方格子( $t'=0$ )から完全にフラストレートした等方的チェッカーボード格子( $t'/t=1$ )にわたる広いパラメータ領域を研究対象とした。ここで得られた基底状態の相図はHubbard相互作用 $U/t$ とフラストレーションの強さ $t'/t$ に依存した3つの独立な量子相で構成されることが分かった。特に、フラストレーションの強い領域( $t'/t \sim 1$ )では対称性の破れたplaquette-singlet絶縁体相が現れた。これらの結果に基づき、量子相転移における幾何学的フラストレーションの役割を明らかにした。

第5章では、三角格子半filled Hubbard模型の基底状態について、改良を加えたPIRG法による研究を行なった。その結果、Coulomb相互作用 $U$ の増加に伴い、金属状態から非磁性絶縁体(NMI)状態への一次相転移が起こり、さらに $U$ を大きくすると、NMI状態から $120^\circ$ のスピン配列を持つNeel秩序状態への一次相転移が実現することを明らかにした。そして有機伝導体 $\kappa-(\text{BEDT-TTF})_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$ はNMI相にある事を明らかにした。

最後に第6章において本論文を総括し、今後の展望について述べた。

以上のように、本論文では、幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系における幾つかの新しい量子相転移について明らかにした。

## 論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

近年の物質合成技術の進展により強相関電子系の中でも幾何学的フラストレーションを有する物質が系統的に合成されており大きな注目を集めている。磁性体においては古典的な磁気秩序が抑制され、非自明な量子相の出現が期待されている。さらに、幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系においてはフラストレーションと電荷自由度の競合により、新奇な物性が現れることが期待されている。本論文では、幾何学的フラストレーションを有する格子上の強相関電子系における物性に関して、経路積分繰り込み群法を用いて理論的研究を行っている。

第 1 章では、幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系における物性に関する研究背景について紹介した後、本論文の目的について述べている。

第 2 章では、理論的手法である経路積分繰り込み群(PIRG)法について説明している。この章では、系統的な計算過程を提案すると共に、新たな反復法を導入することで、従来のアルゴリズムにおける local minimum に捕らわれ易い問題と計算の履歴が結果に影響する問題が克服できることを示している。

第 3 章では、チェッカーボード格子上 half-filled ハバード模型の基底状態について、第 2 章で紹介した改良を加えた PIRG 法による研究を行なっている。ハバード相互作用の増加により一次の金属絶縁体転移が $U_c/t=6.75 \pm 0.25$ において実現し、ここでは二重占有率において飛びの異常が見られることを示している。さらに、ダイマーとブラケットの相関関数について計算を行ない、絶縁体相においてブラケット秩序状態が実現する事を見出している。

第 4 章では、第 3 章における研究を発展させ、異方的チェッカーボード格子上 half-filled ハバード模型の基底状態について、改良を加えた PIRG 法による研究を行なっている。対角方向に沿った飛び移り積分 $t'$ を系統的に変化させて幾何学的フラストレーションの大きさを制御することにより、正方格子( $t'=0$ )から完全にフラストレートした等方的チェッカーボード格子( $t'/t=1$ )にわたる広いパラメータ領域を研究対象としている。ここで得られた基底状態の相図はハバード相互作用 $U/t$ とフラストレーションの強さ $t'/t$ に依存した 3 つの独立な量子相で構成されることを明らかにしている。これらの結果に基づき、量子相転移における幾何学的フラストレーションの役割を明らかにしている。

第 5 章では、三角格子半 filled ハバード模型の基底状態について、改良を加えた PIRG 法による研究を行なっている。その結果、クーロン相互作用 $U$ の増加に伴い、金属状態から非磁性絶縁体(NMI)状態への一次相転移が起こり、さらに $U$ を大きくすると、NMI 状態から $120^\circ$ のスピン配列を持つネール秩序状態への一次相転移が実現することを明らかにしている。そして有機伝導体 $\kappa-(\text{BEDT-TTF})_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$ はNMI相にある事を明らかにしている。

最後に第 6 章において本論文を総括し、今後の展望について述べている。

以上のように、本論文は幾何学的フラストレーションを有する強相関電子系における幾つかの新しい量子相転移について明らかにしたもので、基礎的な面で有益な知見を得ており、応用物理学、特に物性物理学に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。