

令和元年6月20日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17762

研究課題名(和文) 真に量子的な相転移とは何か?—閉じ込めから脱した新しい素励起の数値的研究—

研究課題名(英文) What makes a phase transition genuinely quantum?-Numerical study of deconfined excitations-

研究代表者

諏訪 秀磨 (Suwa, Hidemaro)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・助教

研究者番号：60735926

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：統計力学では本質的に多自由度であることにより創発する相転移や臨界現象がひとつの重要なテーマである。相転移の基礎理論として古典的なランダウ理論が確立されており、多くの量子相転移についてもうまく説明する。一方、ランダウ理論の範疇を超える「量子的」な相転移として、近年、脱閉じ込め転移が注目されている。この転移点では閉じ込めを脱した分数励起や非自明な保存量が理論的に予言されている。本課題では2次元量子スピン系に対して経路積分量子モンテカルロ法を用い、脱閉じ込め臨界における励起を数値的に調べ、特徴的な分数励起スペクトルを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究のテーマは、相転移の基礎理論を超える量子相転移の物理を明らかにする点で、統計力学の最も重要な問題のひとつと言える。本課題は、新しい計算手法を開発しながら、非自明な量子相転移での分数励起(通常現れる粒子がいくつかに分れる励起)を初めて明らかにした。我々は励起エネルギーを高精度で見積もる計算手法を開発し、量子モンテカルロ法によるエネルギーギャップ解析を確立させた。この手法を武器として2次元量子スピン系を解析し、分数励起の線形分散関係を明らかにした。本研究は相転移の基礎理論を超える臨界現象における励起状態を明らかにした点で、統計力学と物性物理の発展に大きく貢献する。

研究成果の概要(英文)：Phase transitions and critical phenomena emerging in strongly correlated systems are central topics in statistical mechanics. The Landau theory, which is a standard theory of phase transitions, accounts for many properties of actual phase transitions including many quantum phase transitions. In the meantime, the deconfined quantum criticality has caught the attention as a nontrivial phenomenon rendering a phase transition genuinely quantum beyond the Landau paradigm. At this unusual criticality, deconfined fractional excitations are predicted by an effective field theory. We have studied the deconfined quantum criticality appearing in a two-dimensional quantum spin system using the path-integral quantum Monte Carlo method and elucidated the characteristic spectrum of fractional excitations.

研究分野：物性物理・統計力学

キーワード：量子臨界 脱閉じ込め スピノン 分数励起 量子モンテカルロ スペクトル 対称性

### 1. 研究開始当初の背景

本研究テーマとなる相転移現象は、多自由度物理系の最も興味深い物理現象のひとつと言える。相転移の中でも、秩序変数が連続的に変化する連続相転移（臨界現象）が統計力学的に重要である。これまでの相転移の理解には、ランダウ理論が基礎となってきたが、この理論によると物理系の対称性が自発的にやぶれることで連続相転移が起きる。やぶれる対称性の観点から、空間  $d$  次元系の絶対零度での量子相転移は、多くの場合、 $d+z$  次元系の有限温度での古典相転移として理解できる。ここで  $z$  は動的臨界指数と呼ばれ、量子古典対応の重要な指数となる。

近年、ランダウ理論を超えた、自発的対称性のやぶれを伴わない連続相転移が大きな注目を浴びている（図1）。例えば2次元量子スピン系の磁気秩序を持つネール相と格子秩序を持つ valence-bond solid (VBS) 相の間でその興味深い相転移が起こりうる。このように異なる対称性がやぶれた相の間の転移は、ランダウ理論によると不連続転移となるはずである。しかし新しい理論によると、系の emergent な自由度であるスピノンが閉じ込めから脱して、転移点でのみ量子臨界状態 (deconfined quantum criticality) を作り出す。この非自

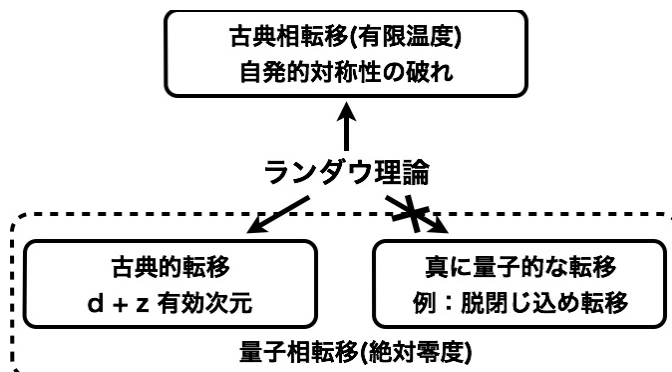


図1: 相転移の分類とランダウ理論の適応範囲.

明な転移は、フラストレート量子スピン系・重い電子系・高温超伝導体等さまざまな物理系で実現すると考えられている。しかしこれらの多くの系は解析が難しく、相転移の検証が容易でない。一方、量子モンテカルロ法で計算可能な量子スピン模型 (J-Q 模型) が近年提案されており、特に2次元 J-Q 模型でこの興味深い脱閉じ込め転移が起きると期待されている。

### 2. 研究の目的

以上を背景に本研究では、ランダウ理論を超える真に量子的な転移となる脱閉じ込め転移の物理を明らかにすることを目的とする。特に脱閉じ込めすると期待されるスピノンが本当に現れるのか、また現れるとしたらどのような励起構造を持つのかという点を詳細に調べる。また新しい数値手法を開発することで、これまで難しかった解析を可能にする。

### 3. 研究の方法

本研究では脱閉じ込め転移を調べるために2次元量子スピン J-Q 模型を用いる。この模型を用いる理由は、量子モンテカルロ法による大規模計算が可能で、臨界性を詳細に調べるのに適しているからである。相転移点では閉じ込めを脱したスピノンによる非自明な励起構造が予想される。そこで申請者が最近開発した効率的なモンテカルロ法とスペクトル解析法を組み合わせ、脱閉じ込め転移点での励起状態を明らかにする。また量子モンテカルロ法の状態更新効率を改善することで計算の精度を向上させる。

### 4. 研究成果

脱閉じ込め転移を起こす基本的な模型のひとつである SU(2) J-Q 模型に対し量子モンテカルロ法を用いて、励起分散関係を明らかにした。最近我々が開発したモンテカルロレベルスペクトロスコーピーを応用し、まず転移点と臨界指数を高精度に求めた。次に励起分散関係のパラメータ依存性を調べ、磁気秩序相でのマグノン励起から臨界点でのスピノン励起への変化を明らかにした。注意深く有限サイズ効果を調べ、正方格子の場合、シングレットとトリプレットの両励起が  $(0, 0)$ ,  $(0, \pi)$ ,  $(\pi, 0)$ ,  $(\pi, \pi)$  の4点でギャップレスとなることを見出した(図2)。また各ギャップレス励起モードにおける励起速度を計算し、熱力学的極限で全て一致する結果を得た。これらの結果は、臨界点でスピノンが解放され、線形分散関係を持つことを強く示唆する。またスピノンの脱閉じ込めと整合する高エネルギーの非自明なレベル秩序を見出した。さらにシングレットとトリプレット励起の非自明な縮退を見出し、臨界点では元々のハミルトニアンより高い対称性[SU(5)]が創発される証拠を得た。これは脱閉じ込め量子臨界理論の修正をせまる重要な発見である。つまり我々の結果は、J-Q 模型が元々の脱閉じ込め理論とは異なる機構で量子臨界性を獲得する可能性を示唆している。このように本研究は相転移の基礎理論を超える臨界現象における励起状態と非自明な対称性を明らかにした点で、統計力学と物性物理の発展に大きく貢献するものである。

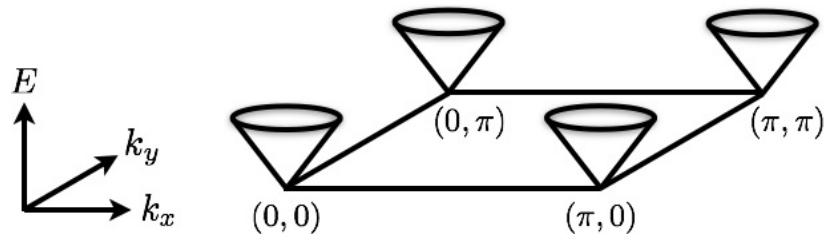


図2：脱閉じ込め転移点におけるスピノンの線形分散関係

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

- ① Hidemaro Suwa, Arnab Sen, and Anders W. Sandvik  
 “Level spectroscopy in a two-dimensional quantum magnet: Linearly dispersing spinons at the deconfined quantum critical point”  
 Phys. Rev. B 94, 144416 (2016)  
 DOI: 10.1103/PhysRevB.94.144416
- ② Toshiki Horita, Hidemaro Suwa, and Synge Todo  
 “Upper and Lower Critical Decay Exponents of Ising Ferromagnets with Long-range Interaction”  
 Phys. Rev. E 95, 012143 (2017)  
 DOI: 10.1103/PhysRevE.95.012143

[学会発表] (計 9 件)

- ① Hidemaro Suwa  
 “Multiple Gapless-Excitation Modes at Neel to Valence-Bond-Solid Transition”  
 2nd Conference on Condensed Matter Physics  
 Nanjing, China, Jul. 2016
- ② Hidemaro Suwa  
 “Quantum Monte Carlo Analysis of Linearly Dispersing Spinons at Deconfined Quantum-Critical Point”  
 Riken Seminar  
 Wako, Japan, Aug. 2016
- ③ Hidemaro Suwa  
 “Linearly Dispersing Spinons at the Deconfined Quantum Criticality”  
 Quantum Criticality and Topology in Itinerant Electron Systems  
 Albuquerque, US, Aug. 2016
- ④ Hidemaro Suwa  
 “Quantum Monte Carlo Analysis of Linearly Dispersing Spinons at Deconfined Quantum-Critical Point”  
 CNLS Seminar  
 Los Alamos, US, Aug. 2016
- ⑤ 諏訪秀麿, Arnab Sen, Anders W. Sandvik  
 「Neel-VBS 転移におけるマルチギャップ励起モード」  
 日本物理学会 2016 年秋季大会  
 金沢、9 月 2016 年
- ⑥ Hidemaro Suwa, Arnab Sen, Anders W. Sandvik  
 “Spinon dispersion at deconfined quantum critical point”  
 1st International Symposium on Research and Education of Computational Science  
 Bunkyo, Japan, Nov. 2016
- ⑦ Hidemaro Suwa, Arnab Sen, Anders W. Sandvik  
 “Linearly dispersing spinons at the deconfined quantum critical point”

APS March Meeting 2017  
New Orleans, US, Mar. 2017

- ⑧ Hidemaro Suwa  
“Worm algorithm with geometric optimization and deconfined spinons at Neel-VBS Transition”  
Frustrated Magnetism  
Chennai, India, Apr. 2017

- ⑨ Hidemaro Suwa  
“How Can We Guide the Worm in a Lattice Model?”  
2nd Critical Behavior in Lattice Models  
Anqing, China, Apr. 2018

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年：  
国内外の別：

○取得状況（計 0 件）

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年：  
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号（8桁）：

### (2) 研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：