

令和 5 年 6 月 14 日現在

機関番号：12301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K03664

研究課題名（和文）フラストレーションとランダムネスにより誘起される新奇量子多体状態の探索と特性解明

研究課題名（英文）Exploration of novel quantum many-body states induced by frustration and randomness

研究代表者

引原 俊哉 (HIKIHARA, Toshiya)

群馬大学・大学院理工学府・准教授

研究者番号：00373358

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：スピン間相互作用が競合（フラストレート）したランダム量子スピン系の高精度解析を可能とする数値計算手法の開発を行った。系のエネルギースペクトルや、量子絡み合い（エンタングルメント）的性質を利用して、基底状態波動関数を精度よく記述するためのアルゴリズムを確立した。また、フラストレート・ランダム量子スピン系における新奇量子状態について、その状態が一次元系でも実現されることを発見した。そして、その状態の特性を解明し、微視的描像を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

フラストレート・ランダム量子スピン系の研究は、その系を精度よく解析できる手法がないという制約のため、その進展が阻害されていた。本研究で開発された数値計算法は、そのフラストレート・ランダム量子スピン系の高精度解析を可能とするものであり、当該分野の研究を大きく進展させるものと期待される。また、本研究で行った、一次元フラストレート・ランダム量子スピン系における新奇量子状態の特性解明は、このフラストレーションとランダムネスにより誘起される状態のもつ普遍的性質を明らかにする結果として、大きな意義をもつものである。

研究成果の概要（英文）：We have developed a numerical method for a highly-accurate analysis of random quantum spin systems with competing (frustrated) exchange interactions. We have established an algorithm to obtain the accurate ground-state wave function using the properties of energy spectrum and quantum entanglement of the systems. We have also studied a novel quantum state in frustrated random quantum spin systems. It has been found that the novel quantum state emerges even in one-dimensional systems. Various properties of the state and its microscopic picture have also been clarified.

研究分野：物性基礎論

キーワード：ランダム量子スピン系 フラストレート量子スピン系 テンソルネットワーク 実空間繰り込み群法

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

本研究課題の対象は、フラストレーションとランダムネスをもつ量子多体系における新奇量子状態である。

フラストレーションとは、複数の相互作用が競合した状況を指す用語である。フラストレーションがある系では、異なる古典的秩序状態が縮退し、そこに量子揺らぎが加わることで、新奇な量子状態がしばしば実現される。また、相互作用がランダムな大きさを持つようなランダム系では、アンダーソン局在など、一様系では見られない量子状態が実現されることが知られている。

このフラストレーションとランダムネスをもつ量子スピン系において、研究課題申請当初、古典的な磁気秩序が消失した量子液体的な新奇状態が実現されるという予測が提案されていた。この状態は、様々なフラストレート量子磁性体で観測されていた量子液体的状態を説明する可能性をもつものとして大きな注目を集めていたが、当時の研究では、その新奇量子液体的状態では磁気秩序が消失すること、および、低温での各種観測量が実験結果と似た振舞いを示すこと、が小規模系の数値計算で示されていたのみで、その新奇状態の特性や微視的描像は未知の状況であった。本研究課題では、この新奇量子状態の特性を解明すること、および、その解明を可能とする解析手法の開発を、研究の動機としていた。

2. 研究の目的

上記の背景を踏まえて、研究課題申請当初においては、

- ・フラストレート・ランダム量子スピン系の低エネルギー状態の特性を明らかにし、その状態を記述する描像・有効理論を構築すること

- ・フラストレート・ランダム量子スピン系の高精度解析が可能な数値計算手法を確立することの2点を研究目的に設定していた。

研究対象のフラストレート・ランダム量子スピン系における新奇量子状態については、古典秩序状態からの摂動論などの近似理論が機能せず、また、負符号問題などの制約により量子モンテカルロ法などの強力な数値計算法が適用できないという手法上の困難のため、大規模・高精度解析を可能とする手法がほぼない状況であった。そのため、本研究課題を進展させるために、まずはフラストレート・ランダム量子スピン系の大規模解析に適用可能な高精度数値計算法を開発することを第一目標とし、その手法と既存の手法を援用することで、新奇量子状態の解析を遂行することを計画した。

3. 研究の方法

本研究課題では、主として以下の2つの方法を並行的・相補的に実施することで、研究を遂行した。

(1)テンソルネットワーク法を基礎とした、フラストレート・ランダム量子スピン系の高精度数値計算法の開発

テンソルネットワーク法とは、量子状態の波動関数を局所的テンソルの縮約(2つのテンソルの足を等置して和を取ったもの)で表す手法の総称であり、量子多体状態を高効率・高精度で記述できる方法として、量子多体系の数値的解析に用いられ、大きな進展を見せている。研究代表者の引原は1999年に、ランダム量子スピン系に適用される強乱雑線り込み群法を改良した拡張実空間線り込み群法(T. Hikihara et al., Phys. Rev. B 60, 12116 (1999))を提唱したが、その後、その手法がテンソルネットワーク法の一つとして定式化され、テンソルネットワーク強乱雑線り込み群(tSDRG)法として、ランダム量子スピン系研究に広く適用されている。本研究課題では、このtSDRG法を基礎として、アルゴリズムに改良を加えることで、フラストレート・ランダム量子スピン系の高精度解析を可能とする数値計算手法の開発・改良を行った。

(2)フラストレート・ランダム量子スピン系における新奇量子状態の数値的解析

相互作用がフラストレートした反強磁性量子スピンハイゼンベルグモデルの解析を行った。1次元ジグザグ梯子格子上のモデルに対する数値計算を行い、比熱など各種観測量の低温特性、および、基底状態相関関数の減衰の指数などを決定した。また、相関関数の空間分布を詳細に解析・視覚化することで、この系で実現される新奇量子状態の微視的描像を明らかにした。

4. 研究成果

本研究課題の遂行により、以下のような成果を得た。

(1) tSDRG 法の改良、および、ツリーテンソルネットワーク構造最適化アルゴリズムの開発

tSDRG 法の繰り込み順序の改善による計算効率向上、および、様々な系における精度比較解析

tSDRG 法は量子系の波動関数をツリー型テンソルネットワーク (図 1) で表現する手法として定式化されるが、その計算効率・精度は、ツリー型テンソルネットワークの構造 (ツリーの形状) に強く依存することが知られている。そのため、解析の対象となる量子状態の特性、特にその状態がもつエンタングルメント (量子絡み合い) 構造に合わせて、ネットワーク構造を最適化することが、本計算手法の精度を向上させるうえで極めて重要となる。tSDRG 法では、スピブロックの合成を繰り返し行い、系の状態を表す基底を順次繰り込んでいくことで、ツリー型テンソルネットワークが形成されるため、ネットワーク構造を最適化することは、繰り込み操作を行うスピブロック対を決定する規則を最適化することとほぼ等価である。

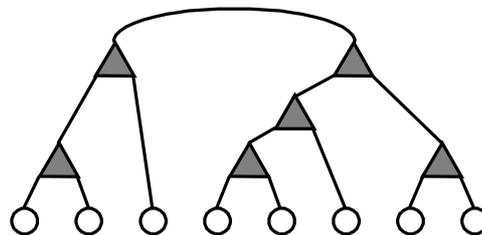


図1:ツリーテンソルネットワークの模式図。丸がスピン、三角がテンソルで、つながれた線(自由度の足)について縮約をとる。

本研究課題において我々は、繰り込みスピブロック対の決定に用いる指標として、ブロックスピ対およびブロックスピ間ハミルトニアンエネルギースペクトルに基づいた様々な指標を採用し、それらを用いたアルゴリズムを一次元鎖格子、二次元正方格子、二次元三角格子上のランダム量子スピン系に適用することで、各指標を用いた計算の性能比較を行い、各系に最適な指標を特定した。この結果、ランダムネスが弱い場合にはブロックスピ対ハミルトニアンのエネルギーギャップを、ランダムネスが強い場合にはブロックスピ間ハミルトニアンのエネルギーギャップを用いたアルゴリズムの方が良い計算性能を示すことが明らかとなった。これらの結果は、ランダムネスの強さによって、tSDRG 法における繰り込みスピブロック対の選択規則を適宜調整するという、計算精度向上における新たな指針を示すものとして、意義をもつ結果と言える。

また我々は、tSDRG 法の繰り込み過程の各ステップにおいて、対象の量子状態における各スピブロック間のエンタングルメントエントロピーを近似的に計算する方法を提案し、そのエンタングルメントエントロピーを繰り込みブロック対決定の指標に用いた tSDRG 法の新しいアルゴリズムを構築した。そして、それらを様々なランダム量子スピン系に適用し、特にランダムネスが弱い場合において、従来のエネルギースペクトルに基づいたアルゴリズムより高い計算効率を実現しうることを明らかにした。この結果は、量子状態のエンタングルメントを直接的に利用した tSDRG 法アルゴリズムの構築という、本手法開発の新たな方向性を示した重要な進展と言える。

ツリー型テンソルネットワークの構造最適化アルゴリズムの提唱・実装

上記の においては、tSDRG 法のスピブロック繰り込み順序を改良することで、ツリー型テンソルネットワークの構造の最適化に取り組んだ。本研究課題では、その改良からさらに一歩進んで、与えられたツリー型テンソルネットワークから出発してネットワークを順次更新することで、自動的に最適なネットワーク構造を決定するような計算アルゴリズムの開発を行った。ここで重要となるのが、対象となる量子系・量子状態のエンタングルメント構造である。一般に、テンソルネットワークを用いた数値計算では、ネットワーク中のボンド (テンソルをつなぐ足) 上で定義されるエンタングルメントエントロピーが小さいほど、小さな計算資源 (計算時間、メモリ) で高精度計算が実現できることが知られている。我々はこの「最小エンタングルメント原理」を指針として、ネットワーク構造を自動的に最適化するアルゴリズムを開発・提唱した。アルゴリズムの概要は以下の通りである。まず、ツリー型テンソルネットワーク中の 2 つのテンソルからなる一部分に着目し、その 2 つのテンソルと周囲のテンソルをつなぐ可能な構造のうち、ボンド上のエンタングルメントを最小とする構造を、最適な局所的構造として採用する (図 2)。そして、そのような局所的構造最適化を、ネットワーク全体を巡回しながら順次行う。この操作をネットワーク構造が収束するまで繰り返すことで、ツリー型テンソルネットワーク全体として最適な構造を得ることができる。我々はこのアルゴリズムに基づく計算コードを実装し、ランダム相互作用系を含む、相互作用に複雑な構造をもつ様々な系に適用した。そして、その結果、本アルゴリズムの計算が摂動論的繰り込み群などから予想される最適構造をもつツリー型テンソルネットワークに収束すること、および、構造最適化されたネットワークを用いた変分計算が従来の方法に比べて計算効率・精度を大きく向上させることを実証した。この

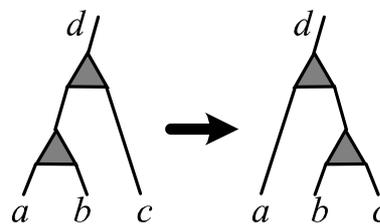


図2: ネットワーク構造の局所的最適化の例。量子からみあい (エンタングルメント) を指標に局所的組み換えを繰り返すことでネットワーク構造全体を最適化する。

我々が提唱したアルゴリズムは、最小エンタングルメント原理に基づいたテンソルの接続の局所最適化を繰り返すことによるネットワーク構造の全体最適化という、新しい方法論を確立したものと、tSDRG法の改良に留まらず、テンソルネットワーク法を用いた研究全般に大きなインパクトを与えるものと言える。また、このツリー型テンソルネットワークの構造最適化アルゴリズムは、本研究課題で行った量子スピン系の基底状態変分計算だけでなく、量子化学計算や、量子計算回路の実時間発展シミュレーション、画像認識・圧縮などの情報処理など、様々な他分野への応用の可能性をもつことから、極めて広い波及効果を持ちうる、今後の発展が期待される結果として、重要なものである。

(2) 新奇量子状態の特性

本研究課題では、フラストレーションとランダムネスをもつ量子スピン系の研究として、密度行列繰り込み群と厳密対角化法を用いた1次元ジグザグ梯子格子ランダムハイゼンベルグ模型、および、tSDRG法を用いた三角格子ランダムハイゼンベルグ模型の計算を行った。このうち、特に重要な結果を得たのは、1次元ジグザグ梯子系の解析である。本研究課題開始当時、フラストレート・ランダム量子スピン系における量子液体的新奇状態は、三角格子模型、次近接相互作用も含む正方格子模型・ハニカム格子模型など、2次元以上のフラストレート格子でその実現が提唱されていたが、その状況において、我々は、同じ特性をもつ量子液体的新奇状態が、1次元系であるジグザグ梯子格子模型でも実現されることを示した。具体的には、1次元ジグザグ梯子格子模型が、基底状態における磁気古典秩序の消失、低温での比熱などの観測量の温度特性、スピン相関関数の微視的空間分布などにおいて、2次元以上の系における新奇状態と同様の振舞いを示すことを確認した。この結果は、本課題の研究対象である、フラストレート・ランダム量子磁性体における新奇量子無秩序相が、格子形状などの系の詳細だけでなく、空間次元という系の形状の本質的な相違を超えて、普遍的に実現されることを示すものであり、その物理的な意義は大きい。また、研究の推進という実効的観点では、2次元以上の系に比べて1次元系は密度行列繰り込み群やボゾン化法など、強力な数値的・解析的手法が適用できるという優位性があることから、1次元系であるジグザグ梯子格子模型で新奇量子状態が実現されるという発見は、今後の研究の発展にブレークスルーをもたらす契機となりうるものであり、その波及効果は大きいと期待される。

さらに、基底状態相関関数の解析から、新奇量子状態の微視的描像を確認したことも大きな成果と言える。本課題で対象とした新奇量子状態では、多くのスピンのランダムに分布したスピンシングレット(一重項)非磁性ペアを組んでおり、この点において、従来ランダムスピン系での存在が知られていたランダムシングレット状態と類似する。しかしながら、本研究課題の新奇量子状態は、対を組まない孤立スピンが遍歴するスピノン励起や、複数のスピンシングレットペアの組み換えを伴うスピン共鳴クラスターが有意に存在するという点で、従来のランダムシングレット状態と本質的に相違しており、フラストレート・ランダムシングレット状態とも呼びうる新しいタイプの状態であることがわかった。この結果は、我々が研究した新奇量子状態が、従来の状態とは異なる繰り込み固定点で記述される、新しいユニバーサルリティクラスに属する状態であることを示唆しており、今後のさらなる研究の端緒となりうる重要な進展と言える。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

| | |
|---|---------------------------|
| 1. 著者名 Hikihara Toshiya, Ueda Hiroshi, Okunishi Kouichi, Harada Kenji, Nishino Tomotoshi | 4. 巻 5 |
| 2. 論文標題 Automatic structural optimization of tree tensor networks | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review Research | 6. 最初と最後の頁 013031-1-11 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.5.013031 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である） | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Seki Kouichi, Hikihara Toshiya, Okunishi Kouichi | 4. 巻 104 |
| 2. 論文標題 Entanglement-based tensor-network strong-disorder renormalization group | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review B | 6. 最初と最後の頁 134405-1-9 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.104.134405 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Uematsu Kazuki, Hikihara Toshiya, Kawamura Hikaru | 4. 巻 90 |
| 2. 論文標題 Frustration-induced Quantum Spin Liquid Behavior in the $s = 1/2$ Random-bond Heisenberg Antiferromagnet on the Zigzag Chain | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan | 6. 最初と最後の頁 124703-1-10 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.90.124703 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である） | 国際共著 - |
| 1. 著者名 A. Miyata, T. Hikihara, S. Furukawa, R. K. Kremer, S. Zherlitsyn, and J. Wosnitza | 4. 巻 103 |
| 2. 論文標題 Magnetoelastic study on the frustrated quasi-one-dimensional spin-1/2 magnet LiCuVO4 | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review B | 6. 最初と最後の頁 014411-1-8 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.103.014411 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 該当する |

| | |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名 Kouichi Seki, Toshiya Hikihara, and Kouichi Okunishi | 4. 巻 102 |
| 2. 論文標題 Tensor-network strong-disorder renormalization groups for random quantum spin systems in two dimensions | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review B | 6. 最初と最後の頁 144439-1-9 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.144439 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計12件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件)

| |
|---|
| 1. 発表者名 引原俊哉, 上田宏, 奥西巧一, 原田健自, 西野友年 |
| 2. 発表標題 ネットワーク構造最適化を含んだツリーテンソルネットワーク法の開発 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 引原俊哉 |
| 2. 発表標題 ランダム量子スピン系に対するテンソルネットワーク数値計算法の開発 |
| 3. 学会等名 第18回量子スピン系研究会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 引原俊哉, 上田宏, 奥西巧一, 原田健自, 西野友年 |
| 2. 発表標題 ネットワーク構造最適化を含んだツリーテンソルネットワーク法の開発II |
| 3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 利根川孝, 引原俊哉, 坂井徹 |
| 2. 発表標題 異方的S=3/2鎖の基底状態相図: トリアティックTLL相とネマティックTLL相 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Toshiya Hikiyara, Kazuki Uematsu, and Hikaru Kawamura |
| 2. 発表標題 Frustrated random-singlet state in the s=1/2 random-bond Heisenberg antiferromagnet on the zigzag chain |
| 3. 学会等名 The International Conference on Frustration, Topology and Spin Textures (ICFTS) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Toshiya Hikiyara |
| 2. 発表標題 Entanglement-based algorithm of the tensor-network strong-disorder renormalization group |
| 3. 学会等名 YITP international workshop Quantum Information Entropy in Physics (国際学会) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 引原俊哉 |
| 2. 発表標題 ジグザグ梯子格子上的S=1/2ランダムハイゼンベルグ模型におけるフラストレート・ランダムシングレット状態 |
| 3. 学会等名 第16回量子スピン系研究会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 T. Hikihara, A. Miyata, S. Furukawa, R. K. Kremer, S. Zherlitsyn, and J. Wosnitza |
| 2. 発表標題 Magnetostriiction of the quasi-one-dimensional frustrated spin-1/2 magnet LiCuVO4 |
| 3. 学会等名 令和2年度 新学術領域研究「量子液晶の物性科学」領域研究会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 T. Hikihara, A. Miyata, S. Furukawa, R. K. Kremer, S. Zherlitsyn, and J. Wosnitza |
| 2. 発表標題 擬一次元 $S=1/2$ フラストレート強磁性体LiCuVO4の磁場中磁歪測定 |
| 3. 学会等名 第15回量子スピン系研究会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 引原俊哉, 上松和樹, 川村光 |
| 2. 発表標題 ランダム J_1 - J_2 スピン鎖におけるフラストレート・ランダムシングレット状態 |
| 3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (2021年) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 上松和樹, 引原俊哉, 川村光 |
| 2. 発表標題 ランダム J_1 - J_2 スピン鎖の基底状態相図と低温特性 |
| 3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (2021年) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 関孝一, 引原俊哉, 奥西巧一 |
| 2. 発表標題 実空間繰り込み群法の改良と二次元ランダム量子スピン系への適用 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会 |
| 4. 発表年 2019年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

| |
|---|
| 個人Webページ https://www.sci.st.gunma-u.ac.jp/%7Ehikihara/ |
|---|

| 6. 研究組織 | | |
|---------------------------|-----------------------|----|
| 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
| | | |

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 | | |
|---------|--|---------------------|------------|
| ドイツ | Hochfeld-Magnetlabor Dresden (HLD-EMFL) | Max-Planck-Institut | TU Dresden |