

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 4月 2日現在

機関番号：12301

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2011

課題番号：21740277

研究課題名（和文）密度行列繰り込み群法の拡張による2次元量子多体系の解析

研究課題名（英文） Study of two-dimensional quantum many-body systems by an advanced algorithm of the density-matrix renormalization group method

研究代表者

引原 俊哉 (HIKIHARA TOSHIYA)

群馬大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：00373358

研究成果の概要（和文）：

低次元フラストレート量子多体系を高精度で解析可能な数値計算手法の開発を行った。量子状態がどれくらい複雑であるかを表す指標であり、かつ、数値計算効率を支配する要素であるエンタングルメントについて調べ、系のエネルギースケールを空間変調させることでエンタングルメントの振舞いを制御しうることを明らかにした。また、低次元フラストレート量子スピンの解析を行い、スピン多極子相など新しいタイプの量子秩序状態の出現を予言する結果を得た。

研究成果の概要（英文）：

We study numerical methods to realize high-precision calculations of low-dimensional frustrated quantum many-body systems. We particularly focus on "entanglement", which is an indicator of complexity of quantum states and governs the efficiency of the numerical approaches to quantum systems. We show that scaling properties and spatial profiles of entanglement can be controlled by applying an energy-scale deformation to the model Hamiltonian. Appearance of novel quantum phases in low-dimensional frustrated spin systems is also predicted.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	2,100,000	630,000	2,730,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
2011年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：物性物理学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：密度行列繰り込み群法、量子スピン系、強相関電子系、フラストレーション、数値計算手法、エンタングルメント

1. 研究開始当初の背景

多数の量子自由度(電子・スピン等)が絡み合う量子多体系の研究は、物性物理学の一大

分野を形成している。特に、量子揺らぎの効果は空間次元が小さいほど顕著になるため、低次元強相関量子多体系は、高温超伝導等の

新奇現象を実現する系として注目を集めている。しかしながら、低次元量子多体系に対しては、フェルミ流体理論や分子場近似、摂動論などの伝統的な近似理論がうまく働かないため、主として手法的な困難がボトルネックとなり、理論研究があまり進んでいないという状況がある。このため、この低次元量子系を非摂動的に扱うことができる数値計算手法の開発が、現在も強く望まれている。

低次元量子多体系を扱う数値計算法としては、密度行列繰りこみ群 (DMRG) 法がある。この手法は、1次元量子多体系の超高精度計算を可能とする手法として、現在広く用いられている。しかし DMRG 法には、2次元以上で精度が極端に悪くなるという難点があるため、2次元量子多体系を高精度で扱うことができる手法はまだ確立されていない。

そのような状況に、研究課題申請当初、ブレークスルーが起きつつあった。変化をもたらしたのは、量子情報研究者の参入である。彼らは、量子数値計算の分野に、量子多体状態をエンタングルメントという観点から解釈しなおすという新しい視点を導入することで、DMRG 法やテンソル積繰りこみ群法などの手法に改良を施す取り組みを行い、その結果、これまでの困難を克服する有望な数値計算手法の枠組みが提案されつつあった。この、エンタングルメントなどの量子情報論的概念を用いた手法改良を推進し、2次元量子多体系における高精度数値計算を実現することが、本研究課題の申請時における研究の動機であった。

2. 研究の目的

本研究課題の申請時における当初の研究目的は、大きく分けて、以下の2点である。

(1) エンタングルメント繰りこみなどの量子情報論的概念を用いて、DMRG 法に代表される行列積・テンソル積変分法の改良を行うことで、2次元量子多体系研究に最適化された数値アルゴリズムを開発し、低次元量子多体系に対する高精度数値計算を実現する。

(2) 異方的三角格子量子スピン系やカゴメ格子模型、J1-J2 量子スピン系などに代表される2次元フラストレート量子スピン系に対する数値計算を行い、低次元フラストレート系の低エネルギー物性について調べる。これらの低次元フラストレート量子スピン系では、量子スピン液体などの新奇な量子状態の出現が期待されるが、これらの系には量子モンテカルロ法等の従来からの数値的手法が適用できないため、その物性の多くが未知の問題として残されている。これらの系の基底状態特性について調べるとともに、これまでに知られていなかった新しい量子状態の探

索を行う。

3. 研究の方法

(1) 2次元量子多体系に適用可能な数値計算手法の開発に取り組む。特に、DMRG 法やテンソル積変分法、Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz (MERA) 法など、行列積・テンソル積の形で表現される変分波動関数を用いた変分法的計算法に着目し、それらを改良・発展させる。これらの手法においては、手法中で採用されている行列積・テンソル積型変分波動関数が、計算対象である量子多体系の低エネルギー状態をいかに効率よく (少ない数の状態基底の重ね合わせで) 記述できるかが、精度向上のために本質的に重要になる。そのため、本研究では、量子自由度の絡み合いの強さを表す指標であり、かつ、行列積・テンソル積型波動関数の状態記述能力に直結する量である量子エンタングルメントに着目し、低次元量子多体状態におけるエンタングルメントの振舞いの解明とその制御を通じて、2次元量子多体系の高精度数値計算実現のための指針を明らかにする。

(2) 低次元フラストレート量子スピン系に対する解析を行い、その低エネルギー特性を調べる。特に、フラストレート系での出現が期待される新奇量子状態に着目し、その出現条件や、新奇状態における各種物理量のパラメータ依存性を明らかにする。解析においては、数値計算手法と解析的手法を組み合わせることで、大規模数値計算により得られた高精度データから物理的情報を効果的に抜き出すための解析スキームを構築する。そして、その手法を適用することで、新奇量子状態を定量的に記述することができる低エネルギー有効理論を導出する。

4. 研究成果

(1) DMRG 法、MERA 法の数値計算コードを作成し、様々な低次元量子スピン系における計算効率の評価と、基底状態におけるエンタングルメントの空間分布の解析を行った。その結果、量子情報理論における基本的な物理量であるエンタングルメント・エントロピーと、系の基底状態における各種相関関数の間の関係性についての知見を得た。

さらに、低次元量子スピン系・フェルミオン系の基底状態におけるエンタングルメント・エントロピーについて調べ、モデル・ハミルトニアンエネルギースケールを空間的に変調させることで、エンタングルメント・エントロピーの振る舞いを劇的に変化させることができることを明らかにした。特に、臨界状態にある1次元量子スピン系においては、系のエネルギースケールを正弦関数の二乗で表される関数に従って変調させるこ

とで、解放端条件下にある系の基底状態を、周期境界条件下の系の基底状態と一致させることができることを発見した。また、このサイン二乗関数を用いたエネルギースケール空間変調が機能するメカニズムを明らかにし、このエネルギースケール変調が、一次元系に限らず、二次元以上の量子臨界系においても、基底状態特性の劇的な変化を実現することを確かめた。この結果は、フラストレーションを持たない単純正方格子系のみならず、二次元異方的三角格子系や対角ホッピングを持つ J_1 - J_2 模型などのフラストレート系にも適用されるため、格子形状によらず一般の量子臨界系においてエネルギースケール変調によるエンタングルメント制御が可能であることを示している。エンタングルメントの振る舞いは、量子多体系数値計算の精度および必要な計算量と密接に関係しているため、エンタングルメント・エントロピーの制御可能性を示した本研究の成果は、低次元強相関電子系・量子スピン系の研究に有効な数値解析スキームの開発に、エネルギースケール変調の利用という新たな視点を加えるものとして意義深い結果と言える。

(2) ① 2次元 J_1 - J_2 モデルの準一次元対応系である、対角スピン間交換相互作用を含んだ 2 本鎖梯子量子スピン系についての研究を行った。DMRG 法による数値計算と弱相関繰りこみ群法による解析計算とを組み合わせることで、この系では、これまでに知られていた rung-singlet 相、Haldane 相の間に、新奇な中間相として、並進対称性が自発的に破れた Columnar-dimer 相が実現されることを明らかにした。本研究結果は、この対角相互作用をもつ 2 本鎖梯子 J_1 - J_2 模型における弱相関繰りこみ群解析の正しさを立証するものであり、その同じ手法が 2 次元 J_1 - J_2 モデルにおいても dimer 相の出現を予言していることと合わせて、2 次元量子スピン系における新奇量子相の出現を強く示唆するものとして大きな意義をもつ結果であると言える。

② 異方的三角格子量子スピン系の準一次元対応系である、ジグザグ梯子量子スピン系についての研究を行った。解析においては、DMRG 法により数値的に計算した各種相関関数のデータをボゾン化法により導出した表式でフィッティングすることで、この系を記述する有効理論である朝永=Luttinger 流体理論中の各種パラメータを定量的に決定するという、本研究代表者が開発した解析手法を適用した。そして、その結果を基に、磁場中ジグザグ梯子量子スピン系で実現される新奇量子状態であるスピン多極子相について、その低エネルギー状態を記述するための定量的有効理論を確立した。

さらに、そのようにして導出した準一次元系に対する有効理論に、鎖間相互作用を分子場近似を用いて取り込むことで、相互作用に空間異方性のある 2 次元・3 次元フラストレート量子スピン系におけるスピン多極子長距離秩序相の出現を予言し、その転移温度の相互作用・磁場依存性を定量的に決定することに成功した。この結果は、 LiCuVO_4 、 $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ 、 $\text{PbCuSO}_4(\text{OH})_2$ などの低次元フラストレート磁性体の実験結果を説明し、これらの物質における新奇量子秩序相の出現を予言するものとして意味のある結果と言える。また、本研究で用いた解析手法は、異方的カゴメ格子量子スピン系など、様々な低次元フラストレート量子スピン系に適用可能であり、低次元フラストレート系の今後の研究の進展に寄与するものとしても、大きな意義をもつものである。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

① Isao Maruyama, Hoshio Katsura, Toshiya Hikihara, Sine-square deformation of free fermion systems in one and higher dimensions, *Physical Review B*, 査読有、vol. 84, 2011, 165132

② Masahiro Sato, Toshiya Hikihara, Tsutomu Momoi, NMR relaxation rate in the field-induced octupolar liquid phase of spin-1/2 J_1 - J_2 frustrated chains, *Journal of Physics: Conference Series*, 査読有、vol. 320, 2011, 012014

③ Toshiya Hikihara, Tomotoshi Nishino, Connecting distant ends of one-dimensional critical systems by a sine-square deformation, *Physical Review B*, 査読有、vol. 83, 2011, 060414

④ Masahiro Sato, Toshiya Hikihara, Tsutomu Momoi, Field and temperature dependence of NMR relaxation rate in the magnetic quadrupolar liquid phase of spin-1/2 frustrated ferromagnetic chains, *Physical Review B*, 査読有、vol. 83, 2011, 064405

⑤ Toshiya Hikihara, Tsutomu Momoi, Akira Furusaki, Hikaru Kawamura, Magnetic phase diagram of the spin-1/2 antiferromagnetic zigzag ladder, *Physical Review B*, 査読有、vol. 81, 2010, 224433

⑥ Toshiya Hikihara, Oleg A. Starykh, Phase diagram of the frustrated spin ladder, Physical Review B, 査読有, vol. 81, 2010, 064432

[学会発表] (計 10 件)

① 引原俊哉, 量子スピン系研究におけるエンタングルメント, 量子スピン系研究会, 2012 年 2 月 17 日, 福井大学 (福井市)

② 引原俊哉, 丸山勲, 桂法称, 二次元量子系におけるサイン二乗変形の効果, 科研費特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」最終成果報告会, 2012 年 1 月 6-8 日, 大阪大学 (吹田市)

③ 引原俊哉, 磁場中フラストレート強磁性スピン鎖におけるカイラル相・スピン多極子相とその観測可能性, 強相関電子系理論の最前線 - 若手によるオープン・イノベーション -, 2011 年 12 月 22 日, 勝浦観光ホテル (和歌山県東牟婁郡)

④ 引原俊哉, 西野友年, 一次元量子臨界系における sine-square deformation の効果, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 2011 年 9 月 21 日, 富山大学 (富山市)

⑤ T. Hikihara, Entanglement entropy in 1D critical system with open boundaries and sinusoidal deformation, New Development of Numerical Simulations in Low-Dimensional Quantum Systems: From Density Matrix Renormalization Group to Tensor Network Formulations, 2010 年 10 月 27 日, 京都大学基礎物理学研究所 (京都市)

⑥ 引原俊哉, 古崎昭, Sergei Lukyanov, $S=1/2$ XXZ 量子スピン鎖におけるダイマー相関関数振幅, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 25 日, 大阪府立大学 (堺市)

⑦ T. Hikihara, O. A. Starykh, Columnar dimer phase in the frustrated spin ladder, International conference Highly Frustrated Magnetism 2010 (HFM2010), 2010 年 8 月 1-6 日, ボルチモア (アメリカ)

⑧ 引原俊哉, O. A. Starykh, フラストレートした 2 本鎖梯子量子スピン系における Columnar dimer 相, 日本物理学会第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 21 日, 岡山大学 (岡山市)

⑨ 引原俊哉, 新手法開発の現状 -- MERA を中心に --, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 2009 年 9 月 25 日, 熊本大学 (熊本市)

⑩ T. Hikihara, DMRG for Tomonaga-Luttinger liquids, Workshop on Matrix Product State Formulation and Density Matrix Renormalization Group Simulations, 2009 年 8 月 12 日, Oxford Kobe Institute (神戸市)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

引原 俊哉 (HIKIHARA TOSHIYA)
群馬大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号: 00373358

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし