

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 19 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400344

研究課題名(和文) 密度行列繰り込み群による多自由度量子多体系の研究

研究課題名(英文) Density matrix renormalization group study on quantum systems of multiple degrees of freedom

研究代表者

柴田 尚和 (Shibata, Naokazu)

東北大学・理学研究科・准教授

研究者番号：40302385

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、電子間相互作用に起因する多様な量子多体状態の存在とその出現過程を明らかにするため、複数の自由度が絡み合う量子多体状態について密度行列繰り込み群を用いて解析した。得られた計算結果と実空間直接観測の実験データとの比較からウィグナー結晶の形成過程を明らかにするとともに、フラストレート量子スピン系における多数の新しい量子多体状態の存在、及び、グラフェンにおけるカイラル対称性の破れとバレー自由度が絡む量子多体状態の安定性の関係を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：Various quantum many body states of interacting systems have been studied by the density matrix renormalization group method. Wigner crystal formation and the physical effects of the mass term to the relativistic quantum Hall states have been clarified. The ground state phase diagrams of the twisted three-leg spin tube, J1-J2 Heisenberg model on the square lattice and the checkerboard lattice have also been determined in magnetic fields with many new quantum states.

研究分野：物理学

キーワード：量子多体効果 量子相転移 分数量子ホール効果 フラストレートスピン系 2次元電子系 朝永ラッティンジャー液体 磁化プラトー ダイヤモンドスピン格子

## 1. 研究開始当初の背景

相互作用によって生じる量子相転移は、物質の性質を大きく変化させ、励起構造を再構成させることで外場応答を一変させる。このような、物質の振る舞いを明瞭に変化させる相互作用の効果は、物質の多様性の起源であり、その理解は多体問題を解くという数理的研究の視点からだけでなく物質の新しい機能の創造や応用を目指す観点からも重要な課題といえる。しかしながら、相互作用によって誘起される相転移の問題をミクロな視点から理解しようとすると、多数の電子によって構成される極めて難しい多粒子系の量子多体問題を解く必要がある。この問題を正確に取り扱う方法は数値的な計算法を含めて限定的であり、量子相転移に至る過程を明らかにする研究は未だ少ないのが現状である。

## 2. 研究の目的

密度行列繰り込み群(DMRG)の方法は、行列積型波動関数を自動生成する精密な変分法であり、摂動計算が不可能な強相関電子系に対しても、与えられた基底の数の範囲で量子多体系の最適化された変分関数を自動的に構成することができる柔軟性の高い計算法である。また、得られる結果に含まれる誤差についての系統的コントロールも可能であり、高い信頼性を確保することもできる優れた解析法である。本研究では量子多体系の相転移とそれに伴って生じる量子多体状態についてDMRGを用いて調べることで、実験的に注目されている磁場中二次元電子系の基底状態、および、フラストレーションのある量子スピン系における磁場誘起プラトー相等の多自由度量子系の性質について明らかにすることを目的とする。

## 3. 研究の方法

量子多体系の相転移に伴う基底状態や励起構造の変化を正しく解析するためには、長距離の量子揺らぎが発達した量子臨界点付近の電子状態を正確に求めることが重要である。また、系のサイズや精度についての系統的な計算も必要になり、限られた計算機資源を効果的に使用する計算手法の最適化が求め

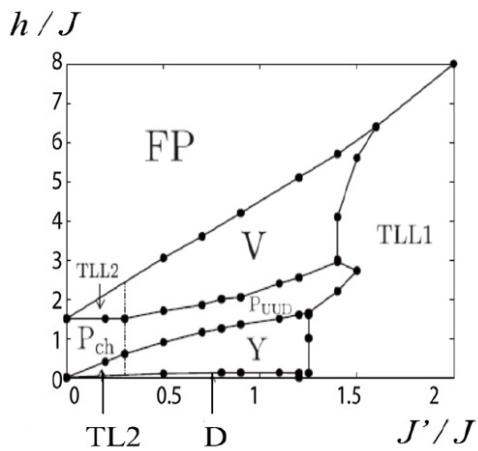
られる。本研究では、誤差の系統的制御が可能であり、摂動計算が不可能な相関電子系の量子相転移の付近においても精密な変分波動関数を生成することができる DMRG の方法を使用した。また、転移点付近では量子化の過程で導入される有限系の境界条件が計算結果に及ぼす影響を最小化するため、エネルギースケールを系の端に向かって漸近的に減少させ、無限小のエネルギースケールをもつ領域を接続させるグランドカノニカル DMRG 法を併用した。これらの計算法を適切に使用することで、量子多体系の相転移を正確に解析できる計算環境を構築し、磁場中二次元電子系における量子固体相や量子液体相への量子相転移、および、フラストレーションのある量子スピン系におけるスピン間相互作用や磁場によって誘起される相転移と励起構造の変化について調べる。

## 4. 研究の成果

(1) ウィグナー結晶は、電子間距離を常に最大化するように電子の波動関数を局在化させ、運動エネルギーの上昇分を上回るクーロンエネルギーの低下を実現させることで電子系全体のエネルギーを下げる多体状態であり、クーロンエネルギーの期待値が運動エネルギーの期待値より大きくなるような低電子濃度において、フェルミ面が存在する液体状態から、結晶状態への転移という量子相転移を伴って現れる。このような相互作用に起因する量子相転移の存在は、古くから知られていた一方で、実際に電子が結晶化することを直接観察した実験はほとんどなく、理論的にも不明な点が多かった。

本研究では、このウィグナー結晶の形成過程を明らかにするため、DMRG 等を用いた理論計算の解析結果と、抵抗検出 NMR 測定を用いて初めて得た実空間直接観測の実験結果を比較解析した。分数量子ホール状態をはじめとする量子液体状態から、ウィグナー結晶という固体相への移行過程の理論計算を行うことで得た結果は、実験結果と整合するものであり、磁場中の二次元電子系においてウィグナー結晶が確かに形成されていることを示すことができた。

(2) 古典スピン系における幾何学的フラストレーションは、一般に基底状態にマクロな縮退を作り出す要因となる。しかし、量子効果を考慮するとフラストレーションによって作られるこの縮退は一気に解かれるため、そこに新しい量子状態が出現する可能性が生じる。そのため、フラストレート量子スピン系では、相互作用や外場の強さに応じて現れる多彩な電子状態の存在が期待されている。このことを確認するため、低次元フラストレート量子スピン系の典型である捻じれた三角スピントラップの磁場中の基底状態の相図をDMRGを用いて調べた。その結果、三角スピントラップの三角形の構造と反強磁性的な相互作用  $J$  の存在により形成されたスピンとカイラリティーの4重のユニットあたりの縮退が、隣接する三角形のスピンとの相互作用  $J'$  によって解かれ、下の図に示すように、磁場  $h$  や相互作用の比  $J'/J$  の大きさに応じてスピン液体 (TLL1, TLL2, TL2, V, Y)、カイラリティー液体 (TLL2, Pch, TL2) を含む9つの量子状態に移行することを明らかにした。



捻じれた三角スピントラップの磁場中相図

また、ダイヤモンド構造の組み合わせによって構成される任意の次元の量子スピン系に対して、厳密な基底状態と励起構造、および系の境界の形状に依存するマクロな残留エントロピーの存在を明らかにした。幾何学的フラストレーションを含む一群の量子スピン系におけるマクロな残留エントロピーの存在は、量子効果を考慮することで得た厳密解を用いて証明した。

(3) 量子多体効果が本質的に重要になる二次元フラストレート量子スピン系である  $J_1$ - $J_2$  正方格子にエネルギースケール変換を施した密度行列繰り込み群を適用し、 $\Psi$  相、Y-like 相、V-like 相という新しい磁場中の量子多体状態を発見した。また、関連するフラストレートスピン系であるチェッカーボード格子においても、スピン励起にギャップがある  $1/4$  と  $3/8$  の磁化プラトー相を新たに発見した。これらの新しい量子多体状態は、競合する相互作用によって拮抗する安定構造が複数存在する状況の下で現れており、外部磁場によって最安定状態が選ばれることで相転移を伴って出現する。複数の相互作用や自由度の存在が、競合する多体効果の起源となり、その関係を調整する外場の変化により多彩な量子相転移が誘起されることを確認した。

(4) 単原子層物質であるグラフェンは、炭素原子が2つの三角副格子を構成するハニカム構造の二次元結晶であり、電子スピンの自由度に加えてバレー自由度が絡む多彩な励起状態が形成される多自由度二次元電子系である。この系に垂直磁場を加えることで観測される分数量子ホール効果とバレー自由度について調べることで、基板上に作成されたグラフェンのカイラル対称性の破れが、電子間相互作用を変化させ、多体効果を通してバレー偏極状態を安定化することを明らかにした。このバレー偏極状態の安定化は、バレー非偏極の励起状態のエネルギーを上昇させるため、バレー偏極した分数量子ホール状態であるラフリン状態が安定化されるという結論を導く。この結果は、基板上のグラフェンにおいて分数量子ホール効果が実験的に明瞭に観測されている事実を理論的に説明する。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計6件)

- ① Katsuhiko Morita and Naokazu Shibata, Multiple magnetization plateaus and magnetic structures in the  $S=1/2$  Heisenberg model on the checkerboard lattice,

Phys. Rev. B, **94** 140404-1-5 (2016), 査読有  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.140404>

- ② Katsuhiro Morita and Naokazu Shibata,  
Field-Induced Quantum Phase Transitions in  $S=1/2$   
J1-J2 Heisenberg Model on Square Lattice, J. Phys.  
Soc. Jpn., **85** 094708-1-5 (2016), 査読有  
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.094708>
- ③ Kouki Yonaga, Kazuki Hasebe and Naokazu Shibata,  
Formulation of the relativistic quantum Hall effect  
and parity anomaly, Phys. Rev. B, **93** 235122-1-9  
(2016), 査読有  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.235122>
- ④ Katsuhiro Morita and Naokazu Shibata, Exact  
Nonmagnetic Ground State and Residual Entropy of  
 $S=1/2$  Heisenberg Diamond Spin Lattices, J. Phys.  
Soc. Jpn., **85** 033705-1-4 (2016), 査読有  
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.033705>
- ⑤ Kouki Yonaga and Naokazu Shibata, Ground State  
Phase Diagram of Twisted Three-Leg Spin Tube in  
Magnetic Field, J. Phys. Soc. Jpn., **84** 094706-1-6  
(2015), 査読有  
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.84.094706>
- ⑥ L. Tiemann, T. D. Rhone, N. Shibata and K.  
Muraki, NMR profiling of quantum electron solids in  
high magnetic fields, Nature Physics, **10** 648-652  
(2014), 査読有  
DOI:10.1038/nphys3031

[学会発表] (計 2 2 件)

- ① 世永 公揮, 柴田 尚和, グラフェンの分数量子  
ホール状態におけるバレー構造と質量項の効果,  
日本物理学会, 2017. 3. 20, 大阪大学 (大阪府・  
豊中市)

- ② 宮澤 溪, 柴田 尚和, エネルギースケールを変  
調させた実空間繰り込み群による不純物問題の  
解析, 日本物理学会, 2017. 3. 18, 大阪大学 (大  
阪府・豊中市)
- ③ 伊藤 拓哉, 柴田 尚和, 捻れた三角スピント  
ューブにおけるカイラリティ由来の磁場中比熱,  
日本物理学会, 2017. 3. 18, 大阪大学 (大阪府・  
豊中市)
- ④ 押山 広樹, 柴田 尚和, 1次元2チャンネル近藤  
格子模型における強磁性相, 日本物理学会,  
2017. 3. 17, 大阪大学 (大阪府・豊中市)
- ⑤ 伊藤 拓哉, 柴田 尚和, 捻れた三角スピント  
ューブにおける磁場中低温比熱, 日本物理学会,  
2016. 9. 16, 金沢大学 (石川県・金沢市)
- ⑥ 森田 克洋, 柴田 尚和,  $S=1/2$  チェッカーボード  
格子の多段磁化プラトーと磁気構造, 日本物理  
学会, 2016. 9. 16, 金沢大学 (石川県・金沢市)
- ⑦ 押山 広樹, 柴田 尚和, 1次元2チャンネル近藤  
格子模型における量子相転移, 日本物理学会,  
2016. 9. 15, 金沢大学 (石川県・金沢市)
- ⑧ 世永 公輝, 長谷 部一気, 柴田 尚和, ディラック  
粒子系における分数量子ホール状態の質量項  
依存性, 日本物理学会, 2016. 9. 13, 金沢大学  
(石川県・金沢市)
- ⑨ 森田 克洋, 柴田 尚和, マクロに縮退した非磁  
性基底状態を持つ新奇  $S=1/2$  ハイゼンベルグモ  
デルの厳密解, 日本物理学会, 2016. 3. 22, 東北  
学院大学 (宮城県・仙台市)
- ⑩ 石山 竜平, 柴田 尚和, 一次元近藤格子模型に  
おける磁化過程の解析, 日本物理学会,  
2015. 9. 18, 関西大学 (大阪府・吹田市)

- ⑪ 若目田 寛, 柴田 尚和, 一次元周期アンダーソン模型における複合粒子金属相, 日本物理学会, 2015. 9. 17, 関西大学 (大阪府・吹田市)
- ⑫ 森田 克洋, 柴田 尚和, J<sub>1</sub>-J<sub>2</sub> 正方格子の磁場誘起相転移の研究, 日本物理学会, 2015. 9. 16, 関西大学 (大阪府・吹田市)
- ⑬ Trevor David Rhone, Kouki Yonaga, Naokazu Shibata, Kouji Muraki, Exploring the Microscopic Structure of Charge Ordered Phases in the Third Landau Level using NMR, 21st International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems, 2015.7.26, 国際センター (宮城県・仙台市)
- ⑭ Naokazu Shibata, Analysis on the response to external field by DMRG calculations, Workshop and Symposium on DMRG Technique for Strongly Correlated Systems in Physics and Chemistry, 2015.6.22, Natal (ブラジル)
- ⑮ 若目 田寛, 柴田 尚和, 一次元周期アンダーソン模型における金属絶縁体転移, 日本物理学会, 2015. 3. 22, 早稲田大学 (東京都・新宿区)
- ⑯ 森田 克洋, 柴田 尚和, J<sub>1</sub>-J<sub>2</sub> 正方格子の古典モンテカルロシミュレーションによる解析, 日本物理学会, 2015. 3. 22, 早稲田大学 (東京都・新宿区)
- ⑰ 森田 克洋, 柴田 尚和, SSD を用いた DMRG による S=1/2 J<sub>1</sub>-J<sub>2</sub> 正方格子の解析, 日本物理学会, 2015. 3. 22, 早稲田大学 (東京都・新宿区)
- ⑱ 柴田 尚和, DMRG による磁場誘起相転移の計算法と応用例, 日本物理学会, 2015. 3. 21, 早稲田大学 (東京都・新宿区)
- ⑲ 世永 公輝, 柴田 尚和, 捻じれた三角スピントューブの磁場相図, 日本物理学会, 2015. 3. 21, 早稲田大学 (東京都・新宿区)
- ⑳ 柴田 尚和, 二次元量子系への DMRG の応用と外場応答の計算, 量子多体系研究の新しい潮流, 2014. 12. 16, 京都大学 (京都府・京都市)
- ㉑ 若目田 寛, 柴田 尚和, 一次元近藤格子模型の低電子密度領域における基底状態の相図, 日本物理学会, 2014. 9. 8, 中部大学 (愛知県・春日井市)
- ㉒ 森田 克洋, 柴田 尚和, SSD を用いた DMRG による二次元フラストレート量子スピン系の解析, 日本物理学会, 2014. 9. 8, 中部大学 (愛知県・春日井市)
- [図書] (計 1 件)
- ① 柴田 尚和 他、アグネ技術センター、固体物理、2015、**50**, 381-392
- [その他]
- ホームページ等  
<http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~shibata/>
6. 研究組織
- (1) 研究代表者  
 柴田 尚和 (SHIBATA, Naokazu)  
 東北大学・大学院理学研究科・准教授  
 研究者番号：4 0 3 0 2 3 8 5