

令和 2 年 6 月 7 日現在

機関番号：37111

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H02926

研究課題名(和文) 二次元フラストレート量子スピン系における磁場誘起トポロジカル相転移の理論

研究課題名(英文) magnetic field induced topological phase transition in two dimensional frustrated spin systems

研究代表者

宮原 慎 (Miyahara, Shin)

福岡大学・理学部・教授

研究者番号：90365015

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 15,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、フラストレート量子スピン系の磁化曲線中にあらわれる磁化プラトー相(磁化の平坦領域)の量子状態をトポロジカルな視点から明らかにし、プラトーと非プラトー相間のトポロジカルな量子相転移の起源を理解することを目指し研究を行い次のような成果を得た。(1) フラストレート量子スピン系の磁化プラトー相における量子状態をベリー位相というトポロジカルな量で特徴づけることに成功した。(2) 異方的三角格子ハイゼンベルク模型の量子プラトー状態の解析を行ない、高磁場領域で新規磁化プラトー相の存在を明らかにした。(3) トポロジカルな相の解析に必要な新規数値計算手法の開発に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

フラストレート系の磁場制御可能な量子状態をトポロジーという新たな視点で理解する点が、本研究の特色・独創性である。本研究は、フラストレーションに起因する現象の中から、磁場中で出現する磁化プラトー現象に着目し、この現象の起源を、トポロジカルな状態という新たな視点から明らかにすることで、フラストレーション系固有の量子状態を理論的に明らかにすることを目指す。磁場中のスピン系という未開拓の系で、新たなトポロジカル状態を発見することは、分野内の研究発展につながることはもちろん、量子コンピューティングの土台構築など、将来的に広く社会に貢献することが期待される。

研究成果の概要(英文)： We clarify the spin liquid state of the magnetization plateau phase (flat region of magnetization) in the magnetization curve of frustrated quantum spin systems from the topological point of view, and the origin of the topological quantum phase transitions between the plateau and non-plateau phases. We achieve the following results. (1) We succeeded in characterizing the quantum state in the magnetization plateau phase of a frustrated quantum spin systems with a topological quantity, Berry phase. (2) The quantum plateau state of the anisotropic triangular lattice Heisenberg model was analyzed, and we show the existence of a novel magnetization plateau states in the high magnetic field region. (3) We have succeeded in developing a new numerical calculation method required for topological phase analysis.

研究分野：物性理論

キーワード：磁性

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

量子スピン系において、フラストレーションの効果が注目を集めている。フラストレーションとは、反強磁性体格子の幾何学条件により起こるスピン配列の不安定性であり、この不安定性によって引き起こされる量子揺らぎにより特異な量子状態が出現する。磁化プラトーはそのような状態の一つで、磁化曲線の途中の磁化が平坦領域を示し、その値が(飽和磁化を1として)特定の分数  $p/q$  に量子化されるものである。プラトー状態は、磁気励起にギャップ(スピンギャップ)をもった磁場変化の摂動に対して安定な量子状態であり、磁場制御によりギャップ相(プラトー相)とギャップレス相(非プラトー相)間の量子相転移が生じる。申請者は、二次元フラストレート直交ダイマースピン系  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  において、フラストレーションの効果により磁場誘起量子相転移が起こり、磁化プラトーで特異な量子状態が出現することを理論的に明らかにした(Miyahara *et al.* PRL 1999、Kodama, Miyahara, *et al.* Science 2002)。この研究を受け、フラストレートスピン系における磁場誘起相転移現象は多くの研究者に注目されるようになり、現在も世界中で活発に研究が行われている。

スピン回転対称性(SU(2)対称性)を有する系における磁化プラトーは古典スピン系では出現しない現象であり、純粋な量子多体効果である。したがって、磁化プラトーの起源を明らかにすることは、単にこの現象の解明にとどまらず、量子フラストレート系および磁場誘起量子相転移の基礎理論を発展させるためにも重要である。しかしながら、量子多体系に不可避であるさまざまな困難によって、これらの全貌はいまだつかめていないのも現状である。また、磁化プラトーの磁気的安定性に対して量子ホール効果との類似性が示唆されており、磁化プラトーにおいて、トポロジカルな状態および量子エンタングルメント状態との関連が期待される。しかし、実験結果の磁化プラトーに対する簡単な対応関係やそのトポロジカル数は知られていない。このためにもまず磁化プラトーの起源をトポロジカル不変量の視点から統一的に明らかにする必要がある。また、純粋な量子効果として発現する磁化プラトー状態は、量子コンピュータのリソースとして注目を浴びる量子エンタングルメントを必然的に内包している。しかし、磁化プラトーを用いた量子情報理論は存在しないため、まず基底状態もつ量子エンタングルメントを解明することが要求されている。近年、トポロジカルな系および量子エンタングルメント系は、物性物理の分野でも非常に注目を集めている分野であり、最近の研究発達に伴い、これらの系の理解や解析手法が進歩を遂げている。これらの新たな視点に基づき磁場中量子スピン状態の解析を行うことで、磁化プラトーの研究が新たな展開を見せることが期待される。

### 2. 研究の目的

本研究では、フラストレーションのある二次元量子スピン系における磁化プラトーに対する理論研究を包括的に行うことを目的とする。新規手法を用いた数値計算を軸に、トポロジカルな状態や量子エンタングルメント状態との関係を明らかにすることで、新たな視点からの磁化プラトーの統一的理解の確立を目指す。また、現実の物質における磁場誘起トポロジカル相転移や量子エンタングルメント状態の観測法、制御法を提唱することで、実験グループを含んだ本研究分野の更なる発展につながるための礎を築く。これらを総合して、フラストレートスピン系や磁場誘起量子相転移の研究発展につながる基礎理論を構築する。研究期間内には以下のことを明らかにする。

- (1) 新規計算手法を用いて、直交ダイマー格子および異方的三角格子上の二次元フラストレート系量子ハイゼンベルク模型を解析する。種々のパラメータについて、磁場中相図および磁化プラトーにおける基底状態を明らかにする。研究の進捗に応じて、他のモデルの取り扱いも視野に入れる。
- (2) 磁化プラトーを示す量子スピン模型について、ベリー位相などを用いて解析することで、磁化プラトー状態におけるトポロジカルな性質を明らかにする。
- (3) 磁化プラトーを示す代表的物質である直交ダイマー系  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  や異方的三角格子系  $\text{Cs}_2\text{CuBr}_4$  の磁場誘起相転移をトポロジカルな相転移など(2)、(3)で得られた新たな視点から理解し、トポロジカルな状態や量子エンタングルメント状態の観測方法を提唱する。
- (4) トポロジカルな状態および量子エンタングルメント状態の動的な磁場、電場応答を明らかにし、これらの特異な量子状態を操作、制御するために必要な動的理論を構築する。

### 3. 研究の方法

本研究計画では、フラストレート二次元量子スピン系における磁化プラトーに対する理論研究を包括的に行い、トポロジカル相転移など新たな視点から磁場誘起量子相転移を理解することを目的とする。

研究計画の進め方として、

- (1) 直交ダイマー系、異方性のある三角格子ハイゼンベルク模型の磁場中相図を明らかにする。
- (2) ベリー位相などを用いて磁化プラトー状態を調べ、トポロジカルな状態との関連性を明らかにする。
- (3)  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  や  $\text{Cs}_2\text{CuBr}_4$  などで(2)、(3)で発見した新規量子状態の実現可能性を検討する。
- (4) トポロジカル状態などの特異な量子状態における動的応答理論を構築する。

#### 4. 研究成果

##### (1) ベリー位相による磁化プラトー相の識別

フラストレート量子スピン系の磁化プラトー相における量子状態をベリー位相というトポロジカルな量で特徴づけることに成功した。局所的にスピンをひねったハミルトニアンに対して厳密対角化法を用いて、基底状態の波動関数を計算する。ひねり角を連続的に変化させることで、基底状態からベリー位相を定義する。磁化プラトーの実現する量子スピン状態において、ベリー位相が、 $1/2$ 、などの定数倍に量子化された値をもつことが示された。この結果、磁化プラトー相は、ベリー位相というトポロジカルな量で区別可能なトポロジカルな量子状態といえることが分かった。トポロジカルな量子相転移の判定にベリー位相が有効であり、磁化曲線中の量子相転移をトポロジカル数で区別することで、磁化プラトー現象の統一的理解につながると期待される。一次元ダイマー鎖、テトラマー鎖[図1]、二次元 $1/5$ 欠損系、直交ダイマー系などで実現する磁化プラトー相においてベリー位相を計算し、ベリー位相が量子化されることを示し、様々な量子スピン系におけるスピングャップ相の識別およびトポロジカルな量子相転移の判別に有効となることを明らかにした。

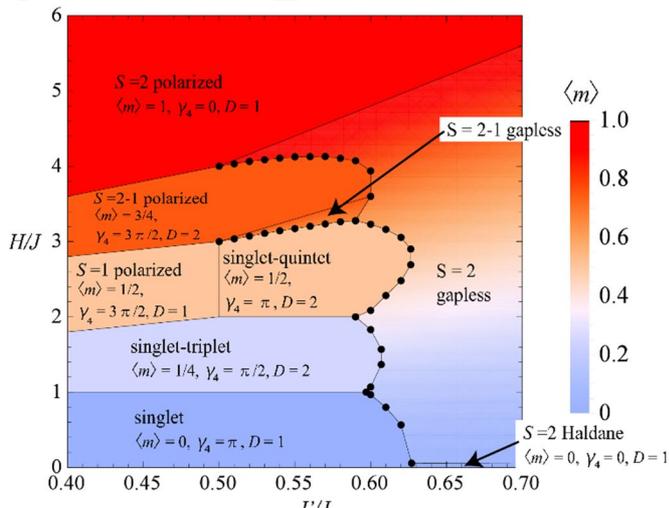


図 1. テトラマー鎖の磁場中相図。ベリー位相ベリー位相  $\gamma_4$  を用いて、磁化プラトー相を識別した [1]。

##### (2) 三角格子系物質 CsCuBr<sub>4</sub> の磁化プラトー相

異方的三角格子系物質 CsCuBr<sub>4</sub> に対応するハイゼンベルク模型において、DMRG 法、スピン波計算、厳密対角化法を複合的に行うことで、高磁場領域の磁化プラトーにおける量子スピン状態を明らかにした。理論的に、 $2/3$ 、 $5/7$  のプラトー相で特異な磁気構造が実現することが分かった。プラトー相の安定度は、モデルの相互作用の異方性パラメータに依存する。これらの構造をもとに、実験結果の解析を継続しており、CsCuBr<sub>4</sub> におけるパラメータを見積もり、磁化プラトー状態を明らかにすることで、CsCuBr<sub>4</sub> の磁場誘起量子相転移の起源解明につながることが期待される。

##### (3) 新規数値計算手法の開発

二次元系において、トポロジカルな相転移の同定を精密に行うため、角転送行列繰り込み群の有限相関長スケールリングによるエンタングルメントスペクトル解析の数値的手法開発に成功した。

##### (4) 電場活性なスピングャップ励起

二次元直交ダイマー系において、電場活性な励起が存在することを理論的に明らかにした。スピンと電気分極の結合を利用することで、光の(磁場成分ではなく)電場成分によって、スピングャップ励起が誘起できることを示した。磁場では、誘起できない励起が誘起される場合もあり、磁化プラトーなどの量子状態の低エネルギー励起の物性を明らかにするために、様々な系で、有効となることが期待される。

#### <引用文献>

[1] I. Maruyama and S. Miyahara, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 123703 (2018)

5. 主な発表論文等

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

1. 著者名 Maruyama Isao, Miyahara Shin	4. 巻 87
2. 論文標題 Fractionally Quantized Berry Phases of Magnetization Plateaux in Spin-1/2 Heisenberg Multimer Chains	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 123703 ~ 123703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.123703">https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.123703</a>	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 Hiroshi Ueda, Kouichi Okunishi, Kenji Harada, Roman Krcmar, Andrej Gendiar, Seiji Yunoki,	4. 巻 -
2. 論文標題 Finite-m scaling analysis of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless phase transitions and entanglement	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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

〔学会発表〕 計17件（うち招待講演 3件/うち国際学会 8件）

1. 発表者名 Shin Miyahara
2. 発表標題 Fractionally quantized Berry phase in spin-1/2 Heisenberg multimer chains under magnetic fields
3. 学会等名 Trends in Theory of Correlated Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nobuo Furukawa
2. 発表標題 Flat band and localized excitations in the magnetic spectrum of the fully frustrated dimerized magnet Ba <sub>2</sub> CoSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub> Cl <sub>2</sub>
3. 学会等名 Trends in Theory of Correlated Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Isao Maruyama
2. 発表標題 Topological classification of magnetic plateaux in spin-1/2 Heisenberg multimer chains
3. 学会等名 9th JEMS Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daisuke Yamamoto
2. 発表標題 Synthetic triangular antiferromagnets with ultracold fermions in optical lattices
3. 学会等名 Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daisuke Yamamoto
2. 発表標題 Quantum frustrated magnetism with fermions in triangular optical lattices: Theoretical proposal and prediction
3. 学会等名 ITAMP Harvard Workshop, Fermions in Optical Lattices (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 丸山勲、宮原慎
2. 発表標題 スピン1/2N-mer系ハイゼンベルグ鎖の基底状態
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Miyahara
2. 発表標題 Fractionally quantized Berry phase in spin-1/2 frustrated Heisenberg model
3. 学会等名 StatPhys27 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 I. Maruyama, S. Miyahara
2. 発表標題 Topological Classification of Magnetic Plateaux and Haldane Phase in Quantum Spin Chains
3. 学会等名 2019 MMM Conference (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 上田宏
2. 発表標題 大規模並列化角転送行列繰り込み群を用いた古典スピン系の臨界現象解析
3. 学会等名 第4回 High Performance Computing Physics (HPC-Phys) 勉強会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
研究分担者	古川 信夫  (Furukawa Nobuo)  (00238669)	青山学院大学・理工学部・教授    (32601)	

## 6. 研究組織（つづき）

	氏名 (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	丸山 勲 (Maruyama Isao)  (20422339)	福岡工業大学・情報工学部・准教授  (37112)	
研究分担者	上田 宏 (Ueda Hiroshi)  (40632758)	国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・研究員  (82401)	
研究分担者	山本 大輔 (Yamamoto Daisuke)  (80603505)	青山学院大学・理工学部・助教  (32601)	