

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 4 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540388

研究課題名(和文)量子スピン鎖における新奇相の精密探索とレベルスペクトロスコピー

研究課題名(英文)Elaborate search of exotic phases and level spectroscopy in quantum spin chains

研究代表者

岡本 清美 (Okamoto, Kiyomi)

東京工業大学・理工学研究科・助教

研究者番号：10114860

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文)：量子スピン鎖の相転移点を数値計算データから精密に決める解析方法として我々の開発したレベルスペクトロスコピー法がある。本課題ではこのレベルスペクトロスコピー法を種々のモデルに適用して、新奇相の発見、相図の精密化、などをおこなった。具体的には、異方的 $S=2$ スピン鎖については約20年前の提唱があったものの長い間存在が否定されていたintermediate-D相の存在をはじめて確認した。また、相互作用パラメーターに関する論争が長く続いていたアズライトの磁性に関し、論争に決着をつける結果を得た。

研究成果の概要(英文)：The level spectroscopy is a method for analyzing the numerical data of quantum spin chains to find quantum critical points very accurately, which was developed by our group. We applied the level spectroscopy method to several models, to find exotic phases, and also to obtain precise phase diagrams. For the anisotropic  $S=2$  quantum spin chain, we found the intermediate-D phase for the first time, which was proposed about 20 years ago and has been thought to be absent for long years. Also we obtained a deterministic conclusion for the parameter problem of the magnetism of azurite, which has been in controversy for many years.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：磁性 量子スピン 量子相転移 レベルスペクトロスコピー 数値対角化

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 量子スピンモデルはしばしば統計力学の典型的なモデルとして扱われるが、現実の磁性体の物理的性質を記述するモデルとしての側面も重要であり、量子スピンモデルの理解の発展と現実の磁性体の物理的性質の理解とが相まって大きな発展をもたらした例は多い。我々は量子スピン鎖における Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 型およびその他の量子転移点を数値計算データから精密決定する画期的手法【レベルスペクトロスコピー】と開発し、成果をあげてきた。

(2) 本研究開始直前の時点で、我々は予備的探索で異方的  $S = 2$  鎖モデルとスピナノチューブモデルで相次いで新奇相を発見していた。どちらも現実的モデルであり、素直なモデルにも未知の新奇相が眠っているとの感を強くし、本研究を開始するに至った。特に、異方的  $S = 2$  鎖モデルについてはかつて DMRG による詳細探索が行われたが新奇相は発見されなかった (Schollwock ら) という経緯があり、この種の問題に関する【レベルスペクトロスコピーの優越性】があらためて浮き彫りになっていると考えていた。

### 2. 研究の目的

(1) 本課題の研究目的は、自然な(つまり、過度に人工的ではない)量子スピン鎖モデルにおける新奇相を精密に探索することである。このような課題には数値計算が欠かせないが、代表者の岡本が中心となって開発した【レベルスペクトロスコピー】と呼ばれる数値的対角化データの解析手法をフルに活用し、他の解析的数値的手段も併用する。

(2) 種々の量子スピン鎖モデルについて新奇相を精密に探索し、基底状態相図、新奇相の出現条件、その物理的性質、相の実験的同定法などを明らかにする。具体的テーマとしては、異方的  $S = 2$  スピン鎖、スピナノチューブ、歪んだダイヤモンド型スピン鎖、桁相互作用に異方性のあるスピン梯子、桁相互作用が交代したスピン梯子などを取り上げた。

### 3. 研究の方法

本研究では、種々の量子スピン鎖モデルについて新奇相の精密探索を行い、基底状態相図、新奇相の出現条件、その物理的性質、どういふ実験手段でどういふ結果が得られれば相を同定できるのか、などを明らかにした。研究手段の中心は課題名にもあるレベルスペクトロスコピーで、ハミルトニアンの数値的対角化で得られた低い励起状態のデータを精査して他の手法では困難な量子相転移点を精密決定するものである。これに加えて、物理的洞察(valence bond 描像理論など)、実効ハミルトニアン、ボゾン化、繰り込み群、摂動論のおよび非摂動論的手法、DMRG、など

種々の手法を総動員した。手法が多様にわたるため随時研究協力者数人の協力を得、また低次元量子スピン系の実験グループとも連絡を取り合い理論と実験が互いにフィードバックしあうという極めて望ましい状況を創出した。

### 4. 研究成果

(1) 異方的  $S=2$  鎖については 1992 年に押川の intermediate-D (ID) 相の提案があった。その後、1990 年代後半の DMRG を用いた研究によって ID 相の存在は否定されていたが、我々はレベルスペクトロスコピーを活用することにより ID 相が存在することを示した。ID 相の領域は非常に狭い。また、ハルデン相と large-D (LD) 相が実は同じ相に属していることも示した。この結果は最近発展している「対称性によって守られたトポロジカル相」の非常に良い例になっている。また我々は各相の物理的描像を明らかにし、DMRG を用いて鎖の端に局在した励起モードの振舞いが物理的描像と符合することを示した。また、 $(S_z)_z^{-4}$  に比例する項を導入し、どのような異方性の項が ID 相の領域を拡大させるかも明らかにした。

(2) スピナノチューブについては飽和磁化の  $1/3$  磁化プラトーの機構が交代する付近でプラトー幅が増大するという異常な振舞いを数値計算で見いだした。機構交代点ではプラトー幅はゼロあるいは減少するのが普通である。我々は異常振舞いの機構を明らかにし、振舞いの様子を精度良く記述する理論も構築した。またスピニンバランス相なども発見している。

(3) 歪んだダイヤモンド鎖については、このモデルの具現物質であるアズライト(藍銅鉱)について相互作用パラメーターの符号に関する論争が長く続いていた。うなわち、3種類の相互作用が全部反強磁性的であるとすることが我々の立場であり、1つが強磁性的であるとする立場のグループもあった。最近、従来考えられていた相互作用の他にモノマー間相互作用が重要という提案がなされたので(Jeschke ら)、我々はモノマー間相互作用の入った場合の相図をレベルスペクトロスコピーを用いて確定した。実験より推定された相互作用パラメーターと相図の関係については以前の相図は多少不満な点が残っていたのであるが、モノマー間相互作用を入れた新しい相図ではその点も完全に解消された。これによりパラメーター論争はモノマー間相互作用も含めて4種類の相互作用が反強磁性的であるとおいう我々の年来の主張を敷衍したものでほぼ終結したものと考えられる。

(4) 異方的梯子の問題についてはスピニングャップの異常な振る舞いを見いだした。これ

は(2)のスピントューブの磁化プラトーの異常振る舞いと同様の機構によるものである。さらに桁相互作用が交代するモデルも取り上げ、基底状態相図には種々の相が現れることを示した。特に異方性が XY 的であるときにネール相が現れ、イジング的であるときにハルデン相が現れるという「異方性逆転現象」を発見した。この系では桁相互作用が交代するために脚方向のボンド反転対称性が失われており、連続体近似をする前の格子モデルで見た場合に従来のレベルスペクトロスコピーの手法がそのままは使えない。我々はこの問題をサイト反転とスピン回転を用いることによって解決し、レベルスペクトロスコピーの適用範囲を拡大した。

(5) レベルスペクトロスコピーは数値的対角化データを用いて行うのが通常であるので、できるだけ大きな系について対角化が実行できることが重要である。分担者中野を中心として対角化プログラムの整備を行った。中野の手法は世界最高水準に達している。このプログラムを用いて、フラストレーションのある2次元スピン系の研究も行った。具体的には、三角格子、カゴメ格子、手裏剣格子、などである。

(6) 本研究を総括すると、課題名にあるレベルスペクトロスコピーをいろいろなモデルに適用し、種々の新奇相の発見、従来から論争の続いていた問題の解決、など多くの成果を上げることができた。下記にあるように、査読付き論文43件、学会発表など101件(うち、招待講演など8件)を数え、発表数も十分であると考えられる。本課題の総仕上げとして、レベルスペクトロスコピー開発者の岡本(代表者)と野村(分担者)がレベルスペクトロスコピーのレビュー論文を執筆中である。

#### 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43件)

1 Kiyomi Okamoto, Takashi Tonegawa, Toru Sakai and Makoto Kaburagi, Edge Modes in the Intermediate-D and Large-D Phases of the S=2 Quantum Spin Chain with XXZ and On-Site Anisotropies, JPS Conf. Proc., 査読有, to appear  
<http://arxiv.org/pdf/1310.3385.pdf>

2 Toru Sakai and Kiyomi Okamoto, Exotic Magnetism of the Spin Nanotubes, JPS Conf. Proc., 査読有, Vol.2, 2014, pp.010208-1-4  
DOI:10.7566/JSPSC.2.010208

3 Kiyomi Okamoto, Inversion Phenomena of the Anisotropies of the Hamiltonian and the Wave Function in Quantum Spin Chains ,

JPS Conf. Proc., 査読有, Vol.1, 2014, pp.012031-1-4  
DOI:10.7566/JSPSC.1.012031

4 Toru Sakai and Kiyomi Okamoto, Exotic Quantum Phenomena of the Spin Nanotubes JPS Conf. Proc., 査読有, Vol.1, 2014, pp.012025-1-4  
DOI:10.7566/JSPSC.1.012025

5 Takashi Tonegawa, Kiyomi Okamoto, Shunsuke C. Furuya and Toru Sakai, Anomalous behavior of the spin gap of a spin-1/2 two-leg antiferromagnetic ladder with Ising-like rung interactions, Phys. Status Solidi B, 査読有, Vol.250, 2013, pp.575-578  
DOI:10.1002/pssb.201200757.

6 Hiroki Nakano and Toru Sakai, The Two-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet on the Shuriken Lattice --- A Lattice Composed of Vertex-Sharing Triangles ---, J. Phys. Soc. Jpn, 査読有, Vol.82, 2013, pp.083709-1-5  
DOI:7566/JPSJ.82.083709

7 Hiroki Nakano, Synge Todo and Toru Sakai, Long-range Order of the Three-Sublattice Structure in the S=1 Heisenberg Antiferromagnet on the Spatially Anisotropic Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn, 査読有, Vol.82, 2013, pp.043715-1-5  
DOI:10.7566/JPSJ.82.043715

8 Kouichi Okunishi, Masahiro Sato, Toru Sakai, Kiyomi Okamoto and Chigak Itoi, Quantum Phase Transition in 1/3 Plateau of the Quantum Spin Tube, J. Korean Phys. Soc., 査読有, Vol.163, 2013, pp.596-600  
DOI:10.3938/jpks.63.596

9 H. Yamaguchi, K. Iwase, T. Ono, T. Shimokawa, H. Nakano, Y. Shimura, N. Kase, S. Kittaka, T. Sakakibara, T. Kawakami and Y. Hosokoshi, Unconventional Magnetic and Thermodynamic Properties of S=1/2 Ladder with Ferromagnetic Legs, Phys. Rev. Lett., 査読有, Vol.110, 2013, pp.157205-1-5  
DOI:10.1103/PhysRevLett.110.157205

10 Kouichi Okunishi, Masahiro Sato, Toru Sakai, Kiyomi Okamoto, and Chigak Itoi, Spin-Chirality Separation and  $S_3$ -Symmetry Breakings in the Magnetization Plateau of the Quantum Spin Tube, Phys. Rev. B, 査読有, Vol.85, 2012, pp.054416-1-6.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.85.054416

〔学会発表〕(計 101 件)

うち、招待講演(等)は 8 件

1 岡本 清美,【企画講演】歪んだダイヤモンド型スピン鎖とアズライトのパラメーター問題,日本物理学会秋季大会,2014.9(日は未定),中部大学春日井キャンパス

2 岡本 清美,【招待講演】量子スピン系の最近の話題,量子スピン系の物理,2014.5.17,中央大学後楽園キャンパス

3 岡本 清美,利根川 孝,坂井 徹,アズライトのパラメーター問題と歪んだダイヤモンド型スピン鎖のモノマー間相互作用,日本物理学会第 69 回年次大会,2014.3.28,東海大学湘南キャンパス

4 野村 清英,岡本 清美,利根川 孝,坂井徹,F-AF ladder (サイト反転不変)系でのひねり境界条件とパリティ,第 8 回量子スピン系研究会,2013.12.14.福井大学遠赤外領域開発研究センター

5 岡本 清美,利根川 孝,坂井 徹,S=1/2 の歪んだダイヤモンド型スピン鎖のモノマー間相互作用と相図,第 7 回物性科学領域横断研究会,2013.12.1,東京大学武田先端知ビル

6 坂井 徹,佐藤 正寛,奥西 巧一,岡本 清美,大塚 雄一,糸井 千岳,【招待講演】スピンナノチューブの物理,日本物理学会 2013 年秋季大会,2013.9.28,徳島大学常三島キャンパス

7 岡本 清美,太田 仁,【依頼講演】アズライトと歪んだダイヤモンド型スピン鎖(総括),量子スピン系研究会,2013.3.3,新潟大学

8 中野 博生,【招待講演】数値対角化法による 2 次元フラストレート系の研究 --- カゴメ格子反強磁性体と三角格子反強磁性体 ---,東大物性研短期研究会,物性研究所共同利用スパコン成果報告会,2012.2.21,東京大学物性研究所

9 中野 博生,【招待講演】カゴメ格子反強磁性体の磁化過程に現れる異常現象,フロンティア機能物質創製センターシンポジウム,2011.12.18,姫路市じばさんビル

10 中野 博生,【招待講演】カゴメ反強磁性体の新しい量子現象‘磁化ランプ’とスピンギャップ問題,日本物理学会 2011 年秋季大会,2011.9.23,富山大学五福キャンパス

11 中野 博生,【招待講演】量子スピン系の大規模並列数値対角化計算,異分野交流研究

会「量子系の固有値問題と大規模計算」  
2011.7.26,筑波大学計算科学センター

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

岡本 清美 (OKAMOTO, Kiyomi)  
東京工業大学・大学院理工学研究科・助教  
研究者番号: 10114860

### (2) 研究分担者

利根川 孝 (TONEGAWA, Takashi)  
神戸大学・理学研究科・名誉教授  
研究者番号: 80028167

野村 清英 (NOMURA, Kiyohide)  
九州大学・理学研究院・准教授  
研究者番号: 70222205

中野 博生 (NAKANO, Hiroki)  
兵庫県立大学・物質理学研究科・助教  
研究者番号: 00343418