

平成 21 年 5 月 15 日現在

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2006～2008

課題番号：18740230

研究課題名（和文） corner Hamiltonian のくりこみ群的解析

研究課題名（英文） renormalization group analysis of the corner Hamiltonian

研究代表者

奥西 巧一（OKUNISHI KOUICHI）

新潟大学・自然科学系・助教

研究者番号：30332646

研究成果の概要：

低次元量子系の高精度数値計算手法として定着している DMRG 法を corner Hamiltonian に対する Wilson 数値くりこみ群と再解釈することに成功した。また、Wilson くりこみ群のカットオフが赤外発散の正則化に対応することを見出し、一般の量子系へ拡張により XXZ スピン鎖の低エネルギー励起を固定点として求め、朝永 ラッティンジャー液体の別証明を与えた。一方、1 次元 XXZ 模型の相関振幅を計算し、鎖間結合系の磁場誘起非整合秩序相を示した。また、スピン回転変換を通じてジグザグスピン系のスピンカイラリティ秩序を直接計算し、その転移がイジング普遍性であることを明らかにした。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,300,000	0	1,300,000
2007 年度	800,000	0	800,000
2008 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	2,800,000	210,000	3,010,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：密度行列、くりこみ群、corner Hamiltonian

## 1. 研究開始当初の背景

繰り込み群は、現代物理学において最も基本的な概念であるだけでなく、低エネルギーの有効理論を構築する具体的な方法も提供するという意味で極めて実践的でもある。具体的に低次元量子多体系の問題を定量的に解く上では、Wilson の近藤問題への応用以来さまざまな応用がなされている数値的実空

間繰り込み群のアプローチが大変有効で、近年、とくに、密度行列くりこみ群（DMRG）が 1 次元量子系の基底状態に対して強力な手法としてその地位を確立してきた。しかし、DMRG は、実用面が強調されるあまり、その原理的な側面の探求が暗に伏されてきた。DMRG 法は、単純に Wilson の繰り込み群として解釈するにはかなり問題が多かったの

である。Wilson の実空間繰り込み群では、ハミルトニアン $H$ の低エネルギーの状態を重要な状態として選択的に残すが、一方、DMRG では基底状態波動関数から作られる縮約密度行列の大きな固有値を重要な状態として用いる。また、DMRG には、通常の繰り込み群が持っているエネルギースケールをコントロールするカットオフパラメーターが存在しない。DMRG の背後には波動関数の行列積による分解という理論的背景があることは知られてはるが、本来の Wilson 流の繰り込み群としてどういう位置づけになっているのかは、未解決の本質的な問題となっていた。つまり、両者を統一的に解釈する理論が不足していた状態で、数値くりこみ群の統一的解釈と両者の融合が出来ずに、さらなる応用上アルゴリズムの進展にも困難があったのである。

## 2. 研究の目的

1. における状況の下、本研究は、Wilson の繰り込み群としての観点から、DMRG がもともとの系のどのような低エネルギーの有効理論に相当するのかを解明し、DMRG が低次元量子系でなぜこれほどの成功を収めたのか理論的な背明らかにすることを目的とした。これは純粋に理論的に興味深いだけでなく、DMRG の一般化や高次元化に必要な大変重要なステップである。このための鍵となるのが我々の見出した Corner Hamiltonian のアプローチである。Corner Hamiltonian は、1 次元量子可積分系で発展した手法であるが、ここでは DMRG における縮約密度行列と大変密接な関係---すなわち、Corner Hamiltonian が密度行列の生成子に相当すること---に着目した。これは、本研究独自のアイデアであり、かつ、実際に Corner Hamiltonian に対する Wilson 流の実空間繰り込み群が DMRG とほぼ同等に機能するという点で、DMRG の理論的背景解明へ有力候補である。その核心部分、すなわち、熱力学極限における縮約密度行列の固有値分布の性質と通常ハミルトニアンの低エネルギースペクトルとの関係の解明が具体的な研究のターゲットであり、このことにより DMRG から得られる物理的情報の質が格段に向上させることができる。

一方で、もちろん、密度行列くりこみ群の応用として、さまざまな量子スピン系に適用することも常に可能である。本研究では corner Hamiltonian でえられた知見を DMRG の応用にもフィードバックし、量子系のエキゾチックな基底状態の性質を引き出すこともめざした。

## 3. 研究の方法

研究方針としては、まず Corner Hamiltonian

のくりこみにカットオフを導入し、DMRG を Wilson のくりこみ群としての枠組みに乗せた再定式化を行った。Corner Hamiltonian のくりこみ群的解析に基づき、1 次元量子多体問題における DMRG の縮約密度行列の固有値分布の性質と、Wilson 流の低エネルギー有効ハミルトニアンと関係性を明らかにする。すなわち、DMRG 法の縮約密度行列、および、Corner Hamiltonian の固有値スペクトルの比較をおこない、Wilson のくりこみ群としての位置付けを明らかにする。とくに、場の理論的解析と数値的な解析を組み合わせ研究を推し進めた。このとき大規模行列を扱う数値計算を行わなければならないので、科研費により購入した大容量数値演算サーバーを用いた。数値計算と可積分系における厳密解を比較することで模型の個性に起因する部分と普遍的な構造とを区別しながら研究を展開した。具体的な研究内容とその手法は以下の3つである。

- (1) 場の理論では Corner Hamiltonian がローレンツ加速演算子に相当することを言い、これまでの DMRG 法に欠けていたカットオフパラメーターを導入した corner Hamiltonian のくりこみアルゴリズムを構成した。とくに、固有値分布のカットオフ依存性に注目し、通常ハミルトニアンに対するくりこみ群との違いを明らかにすることを試みた。
- (2) (1)とは逆側のアプローチとして、不純物問題限定であった Wilson の数値くりこみ群を一般の1次元量子多体系に拡張した。とくに、低エネルギー固有値スペクトルの漸近的振る舞いを明らかにし、スケール次元やユニバーサルティークラスの抽出を行い、Corner Hamiltonian との直接比較を可能にした。
- (3) DMRG 法、および、Corner Hamiltonian の実空間繰り込み群を用いて、種類の1次元量子系の解析を行い、新奇秩序状態の解明などの物理的な側面を明らかにした。とくにフラストレーションや磁場が入った系等、他の数値的手法では解析の難しかった問題を重点的に解析した。上記の研究で必要になる数値計算では、本科研費により購入したPCクラスターを用いた。

## 4. 研究成果

- (1) corner Hamiltonian に対してカットオフを導入したアルゴリズムを構築し、まず、数学的な背景がよく分かっている可積分 XXZ 模型に対する低エネルギースペクトルの解析をおこなった。ギャップレスの場合の corner Hamiltonian のスペクトルは無限系では縮退しており、

直接数値計算を行うことは困難であることが知られている。本研究の特徴であるカットオフによる正則化を入れ、数値計算をおこなった。その結果、固有値分布の漸近的な振る舞いは、ギャップ系のカットオフの無い場合の corner Hamiltonian のスペクトルとコンシステントであることがわかった。しかし、個々の固有値の値に関しては、可積分系特有の規則的な代数的構造は再現されなかった。これは、カットオフ が、corner Hamiltonian

$$K = \sum_{(nh_{n,n+1})} nh_{n,n+1} \text{ (局所ハミルトニアン)}$$

に陽に含まれている長さスケール  $n$  と、 $h_{n,n+1}$  のエネルギースケールの両方に変調を与えるため、可積分系特有の代数構造に対する摂動が大きくなるためであると考えられる。

一方、励起ギャップの存在するイジング型 XXZ 模型では、系に内在する長さスケールと人為的に導入されたカットオフに付随する長さスケールが競合するため、低エネルギースペクトルの代数的解釈が難しいことが分かった。ギャップ形の corner Hamiltonian おけるカットオフの役割は今後の課題である。

以上のことから、corner Hamiltonian に対するカットオフ を伴うくりこみ群は、ギャップレス系に対しては基本的には機能しており、その固有値スペクトルの漸近解析には非常に有効であると期待される。しかし、可積分系特有の代数構造を再現するには corner Hamiltonian 中の長さスケール  $n$  とカットオフ の相性までを考えた正則化が必要であることがわかった。したがって、格子模型に対応する corner Hamiltonian から、その連続極限をとったモデルのくりこみ群へと深化させることが今後の研究展開として重要になってくると考えられる。

- (2) 不純物問題に対する Wilson 型の数値くりこみ群にエネルギースケールをコントロールするためのカットオフパラメーターを、一般の 1 次元量子多体系に対し人為的に導入し、赤外発散を正則化することにより、実空間くりこみ群を数値的に実行できる枠組みを定式化した。この新しい Wilson 型くりこみ群を、corner Hamiltonian の場合と同様に XXZ 模型に対して実装した。

スピンの異方性が XY 型でギャップレスの場合は、Wilson 型くりこみ群による低エネルギースペクトルが、ペーテ仮設法により得られる有限サイズの低エネ

ルギー励起の構造と完全に一致することを見出した。これは、corner Hamiltonian の場合と異なり、臨界ゆらぎに伴う赤外発散がカットオフに支配される唯一の長さスケールに正則化されて、低エネルギーの振る舞いが代数的な構造まで含めてきれいに再現されていることを示している。また、上記の性質を利用してドレスドチャージと呼ばれる臨界指数の決定に重要な役割を果たす物理量を決定可能であることを示した。この結果は、場の理論により予言される朝永ラッティンジャー普遍クラスに属するスペクトルがくりこみ変換の固定点として導出されることを意味しており、くりこみ群を用いた朝永ラッティンジャー流体の独立な証明になっていることが重要である。

さらに、Wilson 型数値くりこみ群の定式化の過程において、不純物問題の Wilson 数値くりこみ群のカットオフの入り方を分析し、カットオフには格子間隔、状態の削減にともなうカットオフ、および、連続模型を離散自由度系にマップするときのカットオフが存在することを示した。通常、モデルの離散化に伴うカットオフは赤外発散を正則化するが、Wilson 数値くりこみ群では赤外発散のカットオフに相当することを明らかにした。このことによりギャップレスの系においても、無限小の励起を系統的に扱うことが出来ることがわかった。

一方、ギャップフルの系に対しては、やはり、系の内在的なギャップのエネルギースケールとカットオフによるエネルギースケールの競合のために、可積分系特有の代数構造の再現は出来なかった。しかし、カットオフが特定のエネルギースケールを選択的に捕らえていることが 1 粒子波動関数の形から示唆されることが分かった。このことは、以下で述べる今後の研究展開に重要な示唆を与える。

上記のカットオフの役割の分析結果を受けて、不純物問題に対する Wilson の数値くりこみ群と DMRG の対応をつけるための処方を与えることが出来た。具体的には、カットオフをともなう実空間数値くりこみ群を相互作用に変調のある 1 次元量子系の基底状態探索の手法として再解釈した。さらに連続極限を考えることにより、corner Hamiltonian と Wilson 型数値くりこみ群をともに曲がった空間を利用したエネルギースケールの分離法として再定式化できる可能性を指摘した。

(3) DMRG の応用として、近年注目を集めている量子スピン系の磁化プラトー、磁場誘起 3 次元秩序、フラストレーションによる磁化カスプなどの問題を扱い、種々の特徴的な振る舞いを明らかにした。具体的には、三角形量子スピンチューブにおいて、並進対称性の破れたギャップ相とギャップレスの状態の間で量子相転移がおこることを示し、チューブの端に現れる有効スピンの状態が重要であることを示した。また、密度行列くりこみ群を用いてスピンチューブの 1 次元量子相転移の存在を示すことが出来た。

最近、 $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15}$  という擬 1 次元超伝導体が発見された。この物質に対応するジグザグ Hubbard 鎖モデルの詳細な基底状態の電子数依存性について、DMRG 法を用いた計算を行い、相図を決定した。これにより、 $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15}$  の超伝導が、フラストレーションの強い領域で起こっていることなどを明らかにした。

擬 1 次元 XXZ スピン鎖  $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$  の強磁場中 ESR スペクトルに対応する理論計算を行い、さらに臨界指数の厳密計算より、新奇磁場誘起非整合秩序の可能性があることを指摘した。とくに 1 次元 XXZ モデルの相関関数の振幅を、密度行列くりこみ群を用いて数値的に厳密に決定し、磁場誘起非整合秩序相への転移温度の磁場依存性を決定した。

ジグザグスピン系の基底状態におけるベクトルスピカイラリティー秩序状態について、スピン回転に相当するユニタリー変換を施すことでその秩序パラメーターの直接計算を可能にした。これにともない、スピカイラリティー自由度についての量子相転移の相図を決定し、転移のユニバーサリティークラスが  $Z_2$  対称性の敗れに伴うイジングユニバーサリティークラスであることを明らかにした。

以上、研究結果の総括として、corner Hamiltonian および Wilson 型のくりこみ群におけるカットオフの役割に注目し、これまで明らかになっていなかったギャップレス系の数値くりこみ群の基礎を解明するとともに、一般の量子多体系のくりこみ群構築への足場が定めることができた。今後連続場理論も含めた展開が期待できる。

## 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 9 件)

S. Kimura, M. Matsuda, T. Masuda, S. Hondo, K. Kaneko, N. Metoki, M. Hagiwara, T. Takeuchi, K. Okunishi, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama, M. Itoh 『Longitudinal SDW order in a quasi-1D Ising-like quantum antiferromagnet』 Phys. Rev. Lett. 101, 207201 (2008) 査読有

Toru Sakai, Masahiro Sato, Kouichi Okunishi, Yuichi Otsuka, Kiyomi Okamoto, Chigak Itoi 『Quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube』 Phys. Rev. B 78, 184415 (2008) 査読有

Kouichi Okunishi 『On calculation of vector spin chirality for zigzag spin chains』 J. Phys. Soc. Jpn. 77, 114004 (2008) 査読有

Takahumi Suzuki, Naoki Kawashima and Kouichi Okunishi 『Exotic Finite Temperature Phase Diagram for Weakly Coupled  $S = 1/2$  XXZ Chain in a Magnetic Field』 J. Phys. Soc. Jpn. 76, 123707 (4 pages) (2007) 査読有

Kouichi Okunishi and Takahumi Suzuki 『Field-induced incommensurate order for the quasi-one-dimensional XXZ model in a magnetic field』 Phys. Rev. B 76 224411 (2007) 査読有

S. Kimura, T. Takeuchi, K. Okunishi, M. Hagiwara, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama, M. Itoh 『Novel ordering of an  $S = 1/2$  quasi one-dimensional Ising-like antiferromagnet in magnetic field』 Phys. Rev. Lett. 100, 057202 (2008) 査読有

S. Kimura, H. Yashiro, K. Okunishi, M. Hagiwara, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama, M. Itoh 『Field induced order-disorder transition driven by a softening of spinon excitation』 Phys. Rev. Lett. 99, 087602 (2007) 査読有

Kouichi Okunishi 『Wilson-like real-space renormalization group and low-energy effective spectrum of the XXZ chain in the critical regime』 J. Phys. Soc. Jpn. 76 063001 (2007) 査読有

Kouichi Okunishi 『Filling dependence of the zigzag Hubbard ladder for the

quasi-one-dimensional  
superconductor  
Pr<sub>2</sub>Ba<sub>4</sub>Cu<sub>70</sub>{15-delta}』Phys. Rev. B  
75, 174514 (2007) 査読有

[学会発表](21件)

大塚雄一, 奥西巧一, 岡本清美, 松本宗久, 佐藤正寛, 坂井徹『三本鎖スピ  
ンチューブ系における量子相転移の数  
値的研究』日本物理学会秋季大会 千  
葉大学、2006年9月23日

奥西巧一『ジグザグハバード模型のフ  
ィリング依存性 II』日本物理学会秋季  
大会 千葉大学、2006年9月24日

鈴木隆史, 川島直輝, 奥西巧一『正方  
格子反強磁性 S=1/2 XXZ モデルにおけ  
る磁場中非整合 整合秩序の競合』日  
本物理学会春季大会 鹿児島大学、  
2007年3月18日

奥西巧一『Wilson 型実空間くりこみ群  
と XXZ スピン鎖の低エネルギー励起ス  
ベクトル』日本物理学会春季大会 鹿  
児島大学、2007年3月18日

木村尚次郎, 八代晴彦, 萩原政幸, 奥  
西巧一, 何長振, 金道浩一, 谷山智康,  
伊藤満『擬一次元磁性体 BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> の  
強磁場磁性 II』日本物理学会春季大会  
鹿児島大学、2007年3月19日

山口博則, 柏木隆成, 木村尚次郎, 本  
多善太郎, 山田興治, 奥西巧一, 金道  
浩一, 萩原政幸『スピンラダー物質  
Na<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> の強磁場磁化と  
多周波 ESR III』日本物理学会春季大会  
鹿児島大学、2007年3月19日

鈴木隆史, 川島直輝, 奥西巧一『擬一  
次元量子スピン S=1/2 XXZ モデルの磁  
場中秩序状態』日本物理学会秋季大会  
北海道大学、2007年9月21日

木村尚次郎, 竹内徹也, 奥西巧一, 鈴  
木隆史, 萩原政幸, 何長振, 金道浩一,  
谷山智康, 伊藤満『擬一次元磁性体  
BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> の強磁場比熱』日本物理学  
会秋季大会 北海道大学、2007年9月  
21日

奥西巧一, 佐藤正寛, 坂井徹『三角形  
量子スピンチューブにおける 1 次元量子  
相転移』日本物理学会秋季大会 北海  
道大学、2007年9月21日

坂井徹, 大塚雄一, 佐藤正寛, 奥西巧  
一『3 本鎖スピンチューブの磁化過程』  
日本物理学会秋季大会 北海道大学、  
2007年9月21日

田辺孝行, 奥西巧一『Wang-Landau  
シミュレーションによる擬一次元系古  
典スピン模型の解析』日本物理学会春  
季大会 近畿大学、2008年4月24日

奥西巧一, 鈴木隆史『擬 1 次元 XXZ 模  
型における磁場誘起非整合秩序』日本  
物理学会春季大会 近畿大学、2008年  
4月25日

鈴木隆史, 川島直輝, 奥西巧一『弱い  
鎖間相互作用を持つ S=1/2 反強磁性  
XXZ スピン鎖の磁場中非整合スピン密  
度波状態と有限温度転移』日本物理学  
会春季大会 近畿大学、2008年4月  
25日

木村尚次郎, 松田雅昌, 益田隆嗣, 本  
堂英, 金子耕士, 目時直人, 萩原政幸,  
奥西巧一, 鈴木隆史, 何長振, 谷山智  
康, 伊藤満『擬一次元 Ising 型反強磁  
性体 BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> の磁場誘起非整合相の  
観測』日本物理学会春季大会 近畿大  
学、2008年4月25日

本堂英, 益田隆嗣, 松浦直人, 奥西巧  
一, 木村尚次郎, 萩原政幸, 松田雅昌,  
金子耕士, 目時直人『S=1/2 擬一次元  
反強磁性 XXZ モデル物質 BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub>  
のゼロ磁場磁気励起の観測』日本物理  
学会秋季大会 岩手大学、2008年9月  
21日

転移 坂井徹, 奥西巧一, 大塚雄一, 岡  
本清美, 佐藤正寛, 系井千岳『3 本鎖ス  
ピンチューブの量子相転移』日本物理  
学会秋季大会 岩手大学、2008年9月  
22日

奥西巧一『ジグザグスピン鎖のベクト  
ルカイラル秩序』日本物理学会秋季大  
会 岩手大学、2008年9月22日

田辺孝行, 奥西巧一『Wang-Landau  
法を用いた擬 1 次元古典 XXZ 模型のス  
ピンフロップ転移の解析』日本物理学  
会秋季大会 岩手大学、2008年9月  
23日

田辺孝行, 奥西巧一『擬一次元 Ising  
型反強磁性体 BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> の磁歪の  
QMC による解析』日本物理学会春季大  
会 立教大学、2008年4月27日

木村尚次郎, 萩原政幸, 吉居俊輔, 鳴  
海康雄, 寺田典樹, 田中良和, 岩城雅  
裕, 勝又紘一, 奥西巧一, 金道浩一,  
何長振, 谷山智康, 伊藤満, 豊川秀訓,  
石川哲也, 北村英男『擬一次元 Ising  
型反強磁性体 BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> の強磁場中放  
射光 X 線回折』日本物理学会春季大会  
立教大学、2008年4月27日

21 本堂英, 益田隆嗣, 松浦直人, 奥西巧  
一, 木村尚次郎, 萩原政幸, 松田雅昌,  
金子耕士, 目時直人, K. Rule『S=1/2  
擬一次元 XXZ モデル物質 BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub>  
の磁場中磁気励起』日本物理学会春  
季大会 立教大学、2008年4月27日

〔図書〕(計0件)

〔その他〕

6. 研究組織

(1) 研究代表者

奥西巧一 (OKUNISHI KOUICHI)

新潟大学・自然科学系・助教

研究者番号：30332646