

機関番号： 12601

研究種目： 基盤研究（B）

研究期間： 2007～2009

課題番号： 19340109

研究課題名（和文）

モンテカルロ法によるフラストレート量子系およびスピン液体系の研究

研究課題名（英文）

Monte Carlo Study of Frustrated Quantum Systems and Spin Liquids

研究代表者

川島 直輝 (KAWASHIMA, NAOKI)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号： 30242093

研究成果の概要（和文）：新たに開発したモンテカルロ法のアルゴリズムを用いてモデル計算を行うことによって、新しい量子状態の探索と関連した量子臨界現象を解明することに成功した。具体的には（1）幾何学的フラストレーションをもったシャストリサザランド系について1/2プラトー状態の実現条件を明らかにできた。（2）2次元SU(N)量子スピンモデルについてdeconfinement臨界現象の様相を明らかにできた。（3）準2次元古典スピン系について、転移の次数を明らかにできた。

研究成果の概要（英文）：By using newly developed Monte Carlo algorithms, we investigated a number of quantum/classical many-body systems aiming at clarification of novel quantum phases and critical phenomena. In particular, we achieved the following: (1) We obtained conditions for realizing the 1/2 plateau in the magnetization curve of S=1/2 Shastry-Southerland model. (2) We obtained an evidence for the deconfined critical phenomena in SU(N) Heisenberg model. (3) We clarified the order of the phase transition in the frustrated XXZ model on a BCT lattice.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	3,700,000	1,110,000	4,810,000
2008年度	700,000	210,000	910,000
2009年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	5,000,000	1,500,000	6,500,000

研究分野： 計算物性物理

科研費の分科・細目： （分科）物理学 （細目）数理物理・物性基礎

キーワード： 統計力学, 計算物理, モンテカルロ法, ボーズ凝縮, 量子臨界現象

## 1. 研究開始当初の背景

銅酸化物超伝導体のメカニズムに関する議論のなかで、P. W. AndersonがRVB状態の重要性を示唆して以来、強相関系における新しい量子状態、とくにスピン液体状態の探求は最近の物性物理研究における中心的課題の1つになっている。しかし、解析的、計算論的困難さゆえに多くの重要な部分が未解決である。そのような問題のなかから最

近の計算物性物理の進展によってようやく手の届く範囲に入ってきた問題があった。たとえば、量子モンテカルロ法においては、向き付きループアルゴリズムやワームアルゴリズムといった、手法が開発され、その特性や適用範囲がよく分かってきていた。その結果新たに計算が可能になってきた問題として、対角成分に負符号を含むような問題、高い対称性を持つ量子スピン系の拡張問題、さ

らに、双2次相互作用などの高次の相互作用をもつ古典スピン系の問題などがある。このように新たに手の届くようになってきた問題の中には、従来の「自発的対称性の破れ」による単純な説明では説明できない新しいタイプの量子臨界現象である「脱閉じ込め転移」なども含まれており、新しい手法を用いた大規模なモデル計算による物性予測が期待されていた。

## 2. 研究の目的

上記のように最新の計算手法の発展によって計算可能になってきたいくつかの問題をとりあげ、モデル計算による研究することによって、新しい量子状態の探索と関連した量子臨界現象を解明することが本研究課題のねらいである。

具体的な研究対象としてとりあげたのは主に以下の3つである：(1) 鎖間または層間相互作用にフラストレーションのある準1, 2次元量子スピン系, (2) deconfinement 臨界現象に関連したSU(N)ハイゼンベルクモデルなど、高次の相互作用を持った量子スピン系, (3) 幾何学的フラストレーションのある格子(三角格子, FCC格子など)の上のハードコアボーズ系,

第1の準1, 2次元系に関しては、完全に1次元あるいは2次元の場合には多くの計算例がある反面、現実のほとんどの低次元物質で存在する鎖間/面間相互作用の効果が十分に明らかになっていなかった。たとえば、1次元系で生じる朝永-ラッティンジャー液体相などの新奇な量子状態が現実物質ではどのように実現されているかを、1次元系鎖が多数弱く結合されている系の性質を調べることによって、明らかになることを目指した。また、シャストリサザランド格子系のようにフラストレートしたスピン系の奇妙な磁化曲線を再現することで、そのメカニズムを探ることを目指した。

第2の高次の相互作用を持った量子スピン系においては、従来型とはことなるタイプの量子臨界現象の有無が大きな未解決問題という残っている。特に転移の次数が1次かどうかの問題であり、われわれはSU(N)対称性に拡張したハイゼンベルクモデル、とくにJ-Qモデルと呼ばれる拡張に関してその量子臨界特性を明らかにすることを目的とする。

第3の幾何学的フラストレーション系に関しては、対応する量子系に関して絶対零度極限における漸近的な次元低下現象が注目されていた。一方で、有限温度における相転移が通常の3次元XYモデルと同等の転移であるというナイーブな予測に対して疑いがもたれていた。われわれはこれを明らかにすることを目的とした。

## 3. 研究の方法

本研究テーマは代表者・連携研究者のほか、代表者の主宰する研究室に所属する大学院生を研究協力者として進めた。代表者・連携研究者・協力者はそれぞれ主として担当する物理的テーマを持ち、大学院生が担当するテーマについては、代表者と特に密接に連絡をとりながら代表者の責任のもとで実行した。また、準汎用プログラム群の開発については、これを共同作業とし、適宜役割分担を行った。コーディングのうち汎用的でない部分、とくに物理量計測に関する部分については、各サブプロジェクトを主として担当する研究者がコード開発の主体となった。

本申請課題はいくつかの相互に関連するサブプロジェクトに分かれているが、使われる手法が共通であり、共通部分を整備することが必要である。そのため、2007年度は応用時にそれぞれの課題に柔軟に対応できるような比較的汎用性の高いインターフェースを持った計算機プログラム群を作成し、2008年度はこれらを用いて具体的な物理系の研究解析に移ったが、2009年度はこれらを更に発展・完成させた。とくに、双2次ハイゼンベルクモデルでは、転移の次数を明らかにし、磁場中準1次元スピン系では、チェーン間相関関数の長距離振る舞いを確定した。

## 4. 研究成果

(1) ハードコアボーズ系と等価なスピン1/2のXXZモデルについて、シャストリサザランド格子を考えて、シミュレーションを行った。これは、最近発見された新しい磁性体における磁化曲線、とくに飽和磁化の半分のところ一旦磁化曲線に平坦部が現れる現象を理解することを目的としたものである。RKKY相互作用など長距離相互作用の効果までを取り入れた計算プログラムを作成した。またこれを用いて計算を行った結果、短距離相互作用だけでは安定化されない1/2プラトー状態が安定化されることを発見した。

(2) 4体以上の多体相互作用をもつSU(N)ハイゼンベルクモデルについて、反強磁性秩序相(ネール相)から、VBS相への相転移の性質を量子モンテカルロ法によって調べた。これは、従来の「自発的対称性の破れ」による臨界現象の範疇にはならない、新しいタイプの2次転移の可能性を検討することを目的としている。計算の結果、4体相互作用を入れた場合も、6体相互作用を入れた場合も同じ臨界指数であることが分かった。このことは、転移が2次転移であるとする仮定とコンシステントであり、逆に転移が1次転移であるとする、説明しにくい一

致であることから、我々の計算結果はこの転移が2次転移であることを示唆していると考えられる。

(3) b c t 格子上的古典ハイゼンベルクモデルは磁場中有限温度で相転移することが分かっているが、通常の3次元XYモデルと同じ種類の転移を示すかどうかは問題となっていた。我々はb c t 格子上の準2次元フラストレート磁性体の転移の次数が実は1次転移であることを、繰りこみ群と大規模モンテカルロシミュレーションを組み合わせた手法によって明らかにした。

#### 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 8 件)

- ① J. Lou, A. W. Sandvik and N. Kawashima, Antiferromagnetic to valence-bond- solid transitions in two-dimensional SU(N) Heisenberg models with multispin interactions, Phys. Rev. B 80 (2009) 180414(1-4). (査読あり)
- ② Y. Kato and N. Kawashima, Finite-size scaling for quantum criticality above the upper critical dimension: Superfluid Mott-insulator transition in three dimensions, Phys. Rev. E 81 (2010) 011123(1-7). (査読あり)
- ③ Y. Kamiya, N. Kawashima and C. D. Batista, Finite-Temperature Transition in the Spin-Dimer Antiferromagnet BaCuSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 094008-094015. (査読あり)
- ④ Jie Lou, Anders W. Sandvik, and Naoki Kawashima, Anti-ferromagnetic to valence-bond-solid transitions in two-dimensional SU(N) Heisenberg models with multispin interactions, Phys. Rev. B 80 (2009) R180414(1-4). (査読あり)
- ⑤ Qi Zhou, Yasuyuki Kato, Naoki Kawashima, and Nandini Trivedi, Direct Mapping of the Finite Temperature Phase Diagram of Strongly Correlated Quantum Models, Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 085701(1-4). (査読あり)

[学会発表] (計 17 件)

- ① 川島直輝, 「極低温ボーズ粒子系の数値シミュレーション」(招待講演), 第14回久保記念シンポジウム, 2009年1

0月17日, 御茶ノ水.

- ② Naoki Kawashima, Transitions from VBS State to Neel State (invited), CCP2009, December 17 (2009), The Grand Hi-Lai Hotel, Kaohsiung, Taiwan
- ③ Kenji Harada and Naoki Kawashima, MERA Study of Quantum Spin Models on Triangular Lattice (invited), Workshop on Quantum Information Science and Many-Body Physics, Dec. 20 (2009), NCKU, Tainan, Taiwan.
- ④ Naoki Kawashima, Cold Atoms and Simulation of Bosonic Systems (invited), International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories, July 28 (2009), Ohio State University, Columbus, Ohio, USA.
- ⑤ 紙屋佳知, 川島直輝, Cristian D. Batista, 「分離固定点からのクロスオーバーであらわれる一次相転移」, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月20日-23日, 岡山大学.

[図書] (計 0 件)

該当なし.

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

該当なし.

○取得状況 (計 0 件)

該当なし.

[その他]

ホームページ等

<http://kawashima.issp.u-tokyo.ac.jp/>

#### 6. 研究組織

(1) 研究代表者

川島 直輝 (KAWASHIMA, NAOKI)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号: 30242098

(2) 研究分担者

該当なし

(3) 連携研究者

原田 健自 (HARADA, KENJI)

京都大学・情報学研究科・助教

研究者番号: 80303882

鈴木 隆史 (SUZUKI, TAKAFUMI)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号: 40444096

富田 裕介 (TOMITA, YUSUKE)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号: 50361663