

令和 5 年 6 月 16 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K03840

研究課題名（和文）クラスタ単位スピン系を用いた量子機能性探索

研究課題名（英文）Search for Quantum Functionalities in Cluster-Based Spin Systems

研究代表者

杉本 貴則（Takanori, Sugimoto）

大阪大学・量子情報・量子生命研究センター・特任准教授（常勤）

研究者番号：70735662

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題は、(1)スピン・クラスタを単位として構成される量子スピン系を用いて新たな量子機能性を探索し、(2)その機能性発現に最適な量子系を提案することを目的にした。この目的を達成するため、まず、測定型量子計算の候補状態と挙げられるホールデン状態がクラスタ単位量子スピン系で発現する条件を理論的に整理した。この結果、系の端状態や磁化に対する新たな（準）分数化機構を発見した。この機構を用いることで、より精細な量子センシング技術の開発が期待される。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題では、スピン・クラスタにより構成される系を対象にして、次世代ICT技術の核心をなすと期待される量子機能性の新しい候補を探索し、その発現条件の考察を行った。その結果、これまで知られていた量子多体現象であっても、構成の基本要素となる自由度を置き換えることで、異なった形の量子機能性として発現しうることがわかった。このアイデアは、今回の研究対象に限らず、多くの量子多体現象により普遍的に適用できるものであるため、本研究課題で得られた結果は、今後の次世代ICT技術の発展に大きく寄与できるものであると考えられる。

研究成果の概要（英文）：Our purpose of this research project is (1) to search quantum functionality in quantum spin systems consisting of spin clusters and (2) to optimize the quantum functionality by tuning the model parameters in the spin-cluster systems. To achieve the purpose, we have classified the conditions for the Haldane state realizing in the spin-cluster chains. As the result, we find novel mechanisms of quasi-fractionalization of edge state and bulk magnetization.

研究分野：物性物理

キーワード：量子スピン クラスタ 量子機能性 分数化 トポロジカル状態

1. 研究開始当初の背景

量子スピン系は、低次元量子多体系における多彩で不可思議な現象を、演習・観察するためのブレッドボード¹のような役割を担ってきた。実際、高温超伝導やトポロジカル絶縁体など、低次元電子系の本質的な物理のうちのいくつかは、驚くほどシンプルな量子スピン模型を用いて再現され、明快に説明されてきた。昨今は、量子機能性や量子計算技術に対する社会的関心の増大を背景にして、それらの分野への量子スピン系の直接的応用も期待されるようになってきた。例えば、スピンの大きさが整数の場合の反強磁性 1 次元量子スピン鎖で発現するホールデン状態は、「測定に基づく量子計算」素子への応用が提案されている。また、スピンの大きさが半奇数の場合の反強磁性 1 次元量子スピン鎖では、スピン液体と呼ばれるギャップレス状態も実現し、この素励起を用いた、ゼロ抵抗のスピン流素子への応用も提案されている。このように、量子スピン系が示す特異な量子多体状態は、今後さらなる発展を見せると期待できる。一方で、従来のスピン系では、基本となるスピンの自由度や物質中の自然な相互作用の種類に限りがあり、この量子機能性をうまく制御し有用性を示すには困難が生じていた。

この困難を打破するために、本研究では、クラスタ単位スピン系に注目する。ここで、クラスタ単位スピン系とは、強結合した複数のスピン群(クラスタ)が弱い相互作用でマクロに繋がっている系を指す。このような系では、クラスタ内の低エネルギー状態(擬スピンと呼ぶ)のみが低温の物理に寄与する。また、マクロな物性は、クラスタ間相互作用を低エネルギー状態に繰り込んだ結果得られる、擬スピン間の有効相互作用によって支配されることになる。この有効相互作用は、従来の単一スピンが結合した系では難しい、複雑な相互作用も持ち得るため、量子機能性の制御や拡張、さらには新しい機能性を探索するために利用できる。実際、研究開始前の実験との共同研究により、スピン 1/2 のクラスタ単位スピン系で、安定的にホールデン状態が出現する物質(フェドトフ鉱)を発見していた。

2. 研究の目的

本研究では、フェドトフ鉱の研究で得られた知見を応用して、クラスタ単位スピン系に注目し、従来のスピン系で得られた量子機能性の制御・拡張、さらに新規機能性の探索を目的とする。この際、(1)クラスタ単位量子スピン系を用いて新たな量子機能性を探索し、(2)その機能性発現に最適な量子系を提案すること、の2つのステップに分けて目標を設定する。ステップ(1)では、主として、整数スピン・ハイゼンベルグ鎖やキタエフ鎖を発現しうる模型を対象にして、この有効的な構築法を再考して、機能性向上の条件やその特徴を明らかにすることを目指す。ステップ(2)では、機能性向上には不向きであるために切り捨てた特性や自由度に着目する。これらの特徴が量子多体状態として発現するよう、新規クラスタ単位量子スピン模型を構築し、その観測的振舞いや実現可能性について言及・提案することを目指す。

3. 研究の方法

(1) ホールデン状態と同相の基底状態を発現する AKLT 模型に注目する。この AKLT 模型では、双 2 次項と呼ばれる高次項が、スピンギャップの大きさやエッジ状態の局在度など、量子機能性に直接関係する。これら高次相互作用は、1 イオン由来のスピンを扱う限り、調整が困難なパラメータである。一方、クラスタ単位スピン系を対象にすれば、これらの高次相互作用を有効的に大きくすることができる。本研究では、量子機能性に協調的に働く高次相互作用に注目し、これを大きくするようなクラスタ内/外構造を模索する。この際、これまで共同研究を行った実験研究者を含め、有機分子格子や光学格子、ナノドットなどの実験を行う研究者とも積極的に議論を交わし、その実現可能性についても考察・言及する。

(2) 前段階の機能性向上の研究結果を応用し、新規量子自由度を発現するクラスタ内構造を考える。この量子自由度とスピンの結合項を導入し、クラスタ間のスピン相互作用を通して、クラスタ内自由度が結合する有効模型を構築する。このような模型では、量子自由度の分数化やトポロジジーといった性質は、従来とは異なった形で現れる。有効相互作用を求めるために、本研究では、クラスタ内量子準位の厳密解を基にして、縮重した低エネルギー状態に着目し、プリルアン・ウィグナー流の摂動論を用いて、クラスタ単位有効模型を導出する。この有効模型から定性的な性質を議論するとともに、行列積状態変分法などの最新の計算手法の実行を通して、有効模型との対応を考察・言及する。

4. 研究成果

本研究課題は、(1)クラスタ単位量子スピン系を用いて新たな量子機能性を探索し、(2)その機能性発現に最適な量子系を提案すること、を目標としている。この目的を達成するため、まず、この本研究課題のきっかけとなったクラスタ単位ホールデン状態を発現する量子模型の条件を理論的に整理し、さらにこれを他のクラスタ内部自由度に拡張することで、新しい(準)分数化機

¹ ブレッドボード (breadboard) とは、電子回路の試作や実験に用いる電子基板を指す。

構を考案した。この結果、奇数個のスピンの構成されるクラスタ単位スピン系において、ホールデン状態が有限磁化プラトールとして現れることを示した。また、3スピン・クラスタにより構成される三角スピンチューブ格子に注目し、3スピン格子の内部自由度であるカイラリティとスピンの結合系を考案した。このカイラリティ自由度は、低エネルギー領域において、擬スピンとみなすことができるので、スピンとの結合を考えることにより、三重項状態を構成することができる。このクラスタ内の局所的な三重項状態に対し、クラスタ間相互作用を導入することで、カイラリティをサポートされたクラスタ単位ホールデン状態を構成することができる。さらに、このホールデン状態では、端状態として現れる $1/2$ スピンが、実スピンとカイラリティ由来の擬スピンで構成されるため、実スピンの寄与として丁度半分に相当する $1/4$ スピン磁化しか磁場に応答しなくなる。この予想を確かめるため、クラスタの低エネルギー状態を解析的に求め、ブリルアン・ウィグナー流の摂動論を用いて、有効模型を導出した。また、元の模型において、行列積状態変分法を用いた数値計算を実行し、この両者を比べることで、端に現れる $1/4$ スピン磁化を確認した。一方で、元の模型のクラスタ間相互作用を変化させることで、有効模型に高次相互作用を導入できることがわかった。そこで、この高次相互作用が与える影響について解析し、上手くクラスタ間相互作用を調整することで、クラスタ単位ホールデン状態をより安定させることができることを発見した。他方で、本系の相互作用を少し書き換えることにより、系のバルク状態に対しても、マクロな物理量に対する(準)分数化機構を発現させることができることを見出した。この分数化状態は、(擬)磁化プラトールと呼ばれる磁場誘起のスピン・ギャップ状態に対応し、磁化過程を測定することで容易に観測できる。また、この状態を発現させるために必要な相互作用は、2スピン間の双線形項だけであることも重要な点で、リング交換など高次の相互作用が必要ないことから、実験的な実現性が高い模型になっている。

本研究課題で得られた結果は、既に2本の論文にまとめ出版済みであり、その他に査読中と準備中の論文が各々1本ずつあり、これらも早急に出版できるよう進めている。さらに、当初予想していなかったスピン・クラスタが関連する研究として、別に2本の論文を出版することができた。以上より、本研究課題は当初の予定以上に進展した成果を示すことができた。他方で、本研究課題期間は、新型コロナ・ウイルスのパンデミックという未知の災害に見舞われた事によって、研究会や学会の対面実施がほとんどなくなり、そのため実験研究者との新しい共同研究の可能性を模索する活動が大きく制限された。このため、実験家との共同研究を進めることは残念ながら叶わなかったが、この点に関しては今後進めて行きたいと考えている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Sugimoto Takanori, Tohyama Takami	4. 巻 2164
2. 論文標題 Discord effects of inter-cluster interactions on a cluster-based Haldane state in a triangular spin tube	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012029 ~ 012029
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2164/1/012029	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 -
1. 著者名 Sugimoto Takanori, Morita Katsuhiko, Tohyama Takami	4. 巻 2
2. 論文標題 Cluster-based Haldane states in spin-1/2 cluster chains	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 023420-1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.023420	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 Sasaki Kota, Sugimoto Takanori, Tohyama Takami, Sota Shigetoshi	4. 巻 101
2. 論文標題 Magnetic excitations in magnetization plateaus of a frustrated spin ladder	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 144407-1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.144407	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 -
1. 著者名 Suzuki Shintaro, Tamura Ryuji, Sugimoto Takanori	4. 巻 62
2. 論文標題 Classical and Quantum Magnetic Ground States on an Icosahedral Cluster	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 367 ~ 373
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MB2020011	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 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Takanori Sugimoto and Takami Tohyama
2. 発表標題 Fractionalization of Spin in Cluster-Based Haldane State of Triangular Spin Tube
3. 学会等名 International Conference on Strongly-Correlated Electron Systems 2020 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉本貴則
2. 発表標題 クラスター単位スピン系における擬磁化プラトー
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉本貴則, 鈴木慎太郎, 田村隆治
2. 発表標題 2D面体スピン・クラスターにおける磁気基底状態
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第5回領域会議
4. 発表年 2020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
---------	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------