

平成 30 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2017

課題番号：26800199

研究課題名(和文)多不連続点アルゴリズムを用いた磁気異方性のある磁性体と光結合する原子気体の研究

研究課題名(英文)Quantum Monte Carlo study on quantum magnets and bosonic gases coupled to a cavity field based on multidiscontinuity algorithm

研究代表者

加藤 康之(Kato, Yasuyuki)

東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・助教

研究者番号：50708534

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：量子磁性体や冷却原子気体といった量子多体系の有効モデルの数値厳密解を与える量子モンテカルロ法を主軸として、平均場理論、摂動論に基づいた有効モデル構築、厳密対角化法などの、可能な限り近似を排した量子多体モデルの数値計算手法を適宜活用し、いくつかの量子磁性体および混合冷却原子気体の解析を行った。その結果、混合冷却原子気体、量子スピン液体、カイラルソリトン格子といった近年精力的に研究が進められている研究対象に対する新たな知見を得ることに成功した。

研究成果の概要(英文)：We employ the world-line quantum Monte-Carlo (QMC) method for quantum many body systems. The QMC method has been widely used since it obtained numerically unbiased exact solution of theoretical models including many body interactions. In addition to QMC method, we also employ other methods (e.g., the mean-field theory, the perturbation theory, the exact diagonalization method) to investigate topics under intense study such as multicomponent ultracold atomic gases, quantum spin liquids, chiral soliton lattice. As a result, we have obtained new insights on these topics.

研究分野：物性II

キーワード：量子スピン系 量子モンテカルロ法 量子スピン液体 スピン軌道相互作用 電気磁気効果

1. 研究開始当初の背景

世界線量子モンテカルロ (QMC) 法は、量子磁性体や冷却原子気体といった量子多体系の有効モデルの数値厳密解を与える方法であり、広く用いられている。2013年に開発・公表した新しいアルゴリズム、多不連続点アルゴリズムを用いることで、これまでのアルゴリズムの適用範囲外にあった基礎的なモデルのシミュレーションが適用範囲内に入ることがわかった。立方磁気異方性のある量子磁性体はその好例である。モデルの歴史は古く、1926年に本多光太郎氏と茅誠司氏によって日本で始められた。永久磁石の性能で重要なことは転移温度が高いだけでなく、結晶の磁気異方性によってもたらされる高い保磁力があげられる。そのため、古くから磁気異方性の研究が行われてきた。一般に大きいスピン量子数 ($S > 3/2$) をもつ系では単一イオンの立方磁気異方性の効果が存在するが、従来法ではこれを厳密に取り扱うことが困難であった。そこで本研究課題では基礎的な磁性体のモデルに多不連続点アルゴリズムを適用しQMC計算を実装することを出発点に、様々な量子磁性体および冷却原子気体の数値解析を行うことを計画した。

2. 研究の目的

本研究課題の目的は、多不連続点アルゴリズムを用いて、立方磁気異方性のある量子磁性体や光と結合する原子気体などのQMC計算を実装することで、量子磁性体および冷却原子といった量子多体系の新たな知見を得ることである。解析計算が困難な量子多体系のモデルに対して、QMC法は統計誤差の範囲で数値厳密解を与えるため、有効な手法として信頼され広く適用されている。しかしながら、その適用範囲には制限があり、その適用範囲を広げることは重要な課題である。そこで、これまでの方法では原理的に、もしくは実際上困難であった基礎的なモデルに注目して解析を行う。

3. 研究の方法

量子磁性体および冷却原子気体の理論モデルを対象に、これまでの研究で培ってきた経験を活かして、(量子)モンテカルロ法、平均場理論、摂動論に基づいた有効モデル構築、厳密対角化法などを活用し、可能な限り近似を排した量子多体モデルの数値計算を行う。

4. 研究成果

本研究課題における研究成果を以下に示す。なお、文献番号は「5. 主な発表論文等の〔雑誌論文〕」に対応している。

(1) 一般化スピン波理論：スピン波理論は、

量子磁性体の量子効果の評価、中性子散乱実験解析などにしばしば使われている方法である。このスピン波理論を一般化し、 N 種類のボソンを導入したものが、様々なモデルに対して用いられてきた。この一般化スピン波理論の数学的枠組みを、 $SU(N)$ Schwinger boson 表示を用いて整理し、一般の量子磁性体のモデルに適用しやすい形にまとめた。例として、一般の S に対する bilinear-biquadratic model の強磁性・反強磁性相の安定性を評価し、それぞれの安定領域を明らかにした。[文献 13]

(2) 光格子中 2 成分ボーズ混合気体の重いソリトンと表面臨界現象：2 成分の冷却ボーズ気体を同一の光格子中に閉じ込め、格子ポテンシャルの大きさを変化させると、1 成分の場合と同様、モット絶縁体→超流動転移が起こる。しかし 1 成分の場合とは異なり 2 成分の混合気体の場合は、この転移が不連続になる場合があることを QMC 計算により明らかにしていた。本課題における成果は、この転移点近傍で、ソリトンのサイズが発散的に大きくなることを明らかにした点である。不連続転移で特徴的長さが発散する事例として表面臨界性が知られており、本研究ではソリトンサイズの発散と表面臨界現象との関係性を明らかにすることに成功した。[文献 12]

(3) 量子スピンアイスモデルの QMC 計算による解析： $Dy_2Ti_2O_7$ や $Ho_2Ti_2O_7$ といったスピンアイス (SI) 物質では、温度を下げるに従って、高温弱相関相からクロスオーバーを経て低温の広い温度領域で残留エントロピーを伴う古典 SI 状態が観測される。より低温での実験結果は、残留エントロピーが解放されることを示唆しており、本研究では Ising 模型に横成分の強磁性相互作用を加えた $S = 1/2$ XXZ 模型の QMC 計算を用いた解析を行った。その結果、量子効果により残留エントロピーが解放され、古典 SI 状態から量子 SI 状態へとクロスオーバーすることを明らかにした。[文献 11]

また実験グループとの共同研究により、量子 SI の候補物質の $Tb_{2+x}Ti_{2-x}O_{7+y}$ の有効量子スピン模型に QMC 法を適用した。この模型の QMC 計算は負符号問題のため一般に困難である。実際低温の計算では十分な精度が得られなかった。しかし高温領域では、再重み付け法を用いて計算が可能であり、十分な精度の計算が可能である。そこで高温領域の帯磁率の解析、および古典スピン模型を用いた中性子散乱、磁場中比熱、磁化の解析を複合的に用いて有効模型のパラメータを決定し、低温相が電気四極子相であることを明らかにした。[文献 8]

(4) 2 次元および 3 次元トリークコード (TC) の QMC 計算による量子スピン液体の解析：量子情報の分野では量子コンピュータへ

の応用を念頭に、TCの量子誤り訂正に関する研究が盛んに行われている。この模型の基底状態は量子スピン液体であることがわかっており、本研究ではTCに磁気秩序を引き起こす強磁性的な相互作用を導入した模型を取り扱う。従来型のQMC法の本模型への適用は、エルゴード性を満たさず正しい結果を与える計算が実現できない。そこで多不連続点アルゴリズムのアイデアを基にアルゴリズムを改良し、QMC計算を可能にすることに成功した。TCのQMC計算の結果、TCの量子スピン液体相から強磁性相への相転移は次元に依存し、2次元系では連続転移であるのに対して、3次元系では不連続転移であることを明らかにした。[文献10]

(5) 反強磁性横磁場イジング模型のQMC計算による量子三重臨界点(QTCP)の解析：特異な量子臨界現象を引き起こすQTCPを解析する目的で、正方格子上的 J_1 - J_2 横磁場反強磁性イジング模型のQMC計算を実装した。本研究では、絶対零度の反強磁性相から磁場による強制強磁性相への量子相転移が、連続転移から不連続転移へと変わるQTCPが存在することを示し、有限サイズスケールリングを用いて精度良くQTCPの位置を決定することに成功した。QTCPでは反強磁性帯磁率だけでなく一様帯磁率も発散する。QTCPの近接効果として有限温度において一様帯磁率が增大することも明らかにした。[文献9]

(6) 反強磁性正四角台塔系の磁化曲線と電気磁気効果：空間的に低対称な磁気ユニットを内包する量子スピン系の実験による測定結果（磁化曲線、誘電率）の解析を行った。対象物質 $\text{Ba}(\text{TiO})\text{Cu}_4(\text{PO}_4)_4$ は、近年新たに合成されたものであり、第4のジョンソン立体である正四角台塔と類似した形状の磁気ユニット(Cu_4O_{12})を内包している。局所的な空間反転対称性の欠如により、Cuイオンのスピン($S = 1/2$)間にはスピン軌道相互作用由来のDzyaloshinskii-Moriya (DM)相互作用が誘起される。DM相互作用の存在により、スピン空間と実空間とが結合し、空間的な異方性を生み出す。その結果、外部磁場方向に依存した磁化曲線が得られる。本研究では磁化曲線の磁場方向依存性を再現する有効量子スピン模型を構築した。さらに得られた模型のクラスター平均場理論を用いた解析により、実験で観測された反強磁性転移にともなう誘電異常および誘電率の磁場・電場方向依存性をよく再現することがわかった。また、この解析により、有限磁場・有限温度相図を完成させ複数の反強磁性相が安定化することを示した。さらに、見つかった各相における電気分極配置の理論予測を与えるに至っている。[文献7]

(7) キタエフ型相互作用を有する模型の解析：ハニカム格子キタエフ模型は、基底状態

が量子スピン液体であることが厳密に示されている可解な量子スピン模型である。キタエフ模型実現の候補物質の提案に端を発し、研究が盛んに行われている。

本研究ではQMC法を用いて、ハイパーオクタゴン格子やハイパーノナゴン格子といった3次元格子に拡張したキタエフ模型の有限温度相転移の解析を行った。その結果、ハイパーオクタゴン格子の場合には局所的対称性の破れを伴わない相転移が確認された。この転移はこれまでハイパーハニカム格子で確認された相転移と定性的に同一のものあり、相転移温度は局所的に定義される Z_2 保存量（フラックス）を反転するのに要するエネルギーと密接な関係があることを示唆する結果を得た。一方ハイパーノナゴン格子では、不連続転移（一次転移）をとらない、これまでとは異なる非一様なフラックス配置が基底状態に現れ、カイラルスピン液体が実現することを示した。[文献2-4]

別の拡張キタエフ模型の解析も行った。既存のキタエフスピン液体候補物質には純粋なキタエフ模型に付加的なスピン間相互作用が働いていることがわかっている。そこでキタエフ模型を拡張して、キタエフ型相互作用の他に一様なイジング型相互作用を追加した模型の解析を試みた。付加項によりキタエフ模型の可解性は失われてしまう。そのためこれまで用いてきたQMC法の単純な適用は困難である。そこで本研究では厳密対角化法および平均場理論を用いた解析を行った。その結果キタエフ量子スピン液体から、異なる量子スピン液体を経由して磁気秩序相へと逐次転移することを発見した。[文献6]

さらにこれまでのキタエフスピン液体の候補物質を拡張する試みにも成功した。具体的には、これまでの候補物質は d^5 低スピン電子配置を念頭に組み立てられてきたが、キタエフ模型実現可能性を広げ d^7 高スピン電子配置のイオンを有する物質でもキタエフ模型が実現する可能性を指摘した。[文献1]

(8) カイラルソリトン格子系のモンテカルロ計算による解析： $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$ をはじめとしたカイラル遍歴磁性体において、外部磁場によりカイラルソリトン格子と呼ばれる特異なスピン配位が安定化していることが実験的に示され、近年多くの注目を集めている。これまでの理論的研究では、局在スピンの自由度だけを加味した模型の解析が主に行われており、実験で観測されるスピン配位がよく説明されてきた。実験ではカイラルソリトン格子形成に伴い遍歴電子の伝導特性にも異常が観測されている。伝導電子と局在スピンの自由度が相互に与える影響が重要であると考え、伝導電子の自由度を頭に取り入れた模型のモンテカルロ計算を行い、カイラルソリトン形成とそれに伴う伝導度異常を再現することに成功した。[文献5]

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 13 件)

- ①. (査読有) Ryoya Sano, Yasuyuki Kato, and Yukitoshi Motome, Kitaev-Heisenberg Hamiltonian for High-Spin d^7 Mott Insulators, *Phys. Rev. B* **97**, 014408 (2018) (DOI: 10.1103/PhysRevB.97.014408)
- ②. (査読有) Yasuyuki Kato, Yoshitomo Kamiya, Joji Nasu, Yukitoshi Motome, Global constraints on Z_2 fluxes in two different anisotropic limits of a hyperonagon Kitaev model, *Physica B* **536**, 405-407 (2018) (DOI: 10.1016/j.physb.2017.08.008)
- ③. (査読有) Yasuyuki Kato, Yoshitomo Kamiya, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, Chiral Spin Liquids at Finite Temperature in a Three-Dimensional Kitaev Model, *Phys. Rev. B* **96**, 174409 (2017) (DOI: 10.1103/physrevb.96.174409)
- ④. (査読有) Petr A. Mishchenko, Yasuyuki Kato, and Yukitoshi Motome, Finite-temperature phase transition to the Kitaev spin liquid on a hyperoctagon lattice: a large-scale quantum Monte Carlo study, *Phys. Rev. B* **96**, 125124 (2017) (DOI: 10.1103/physrevb.96.125124)
- ⑤. (査読有) Shun Okumura, Yasuyuki Kato, Yukitoshi Motome, Monte Carlo Study of Magnetoresistance in a Chiral Soliton Lattice, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 063701 (2017) (DOI: 10.7566/jpsj.86.063701)
- ⑥. (査読有) Joji Nasu, Yasuyuki Kato, Junki Yoshitake, Yoshitomo Kamiya, and Yukitoshi Motome, Spin-Liquid-to-Spin-Liquid Transition in Kitaev Magnets Driven by Spin Fractionalization, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 137203 (2017) (DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.137203)
- ⑦. (査読有) Yasuyuki Kato, Kenta Kimura, Atsushi Miyake, Masashi Tokunaga, Akira Matsuo, Koichi Kindo, Mitsuru Akaki, Masayuki Hagiwara, Masakazu Sera, Tsuyoshi Kimura, and Yukitoshi Motome, Magnetoelectric Behavior from $S=1/2$ Asymmetric Square Cupolas, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 107601 (2017) (DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.107601)
- ⑧. (査読有) H. Takatsu, S. Kittaka, A. Kasahara, Y. Kono, T. Sakakibara, Y. Kato, S. Onoda, B. Fak, J. Ollivier, J. W. Lynn, T. Taniguchi, M. Wakita, and H. Kadowaki, Quadrupole Order in the Frustrated

Pyrochlore $Tb_{2+x}Ti_{2-x}O_{7+y}$, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 217201 (2016)

(DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.217201)

⑨. (査読有) Yasuyuki Kato, and Takahiro Misawa, Quantum Tricriticality in Antiferromagnetic Ising Model with Transverse Field: A Quantum Monte-Carlo Study, *Phys. Rev. B* **92**, 174419 (2015)

(DOI: 10.1103/PhysRevB.92.174419)

⑩. (査読有) Yoshitomo Kamiya, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, Magnetic Three States of Matter: A Quantum Monte Carlo study of Spin Liquids, *Phys. Rev. B* **92**, 100403(R) (2015)

(DOI: 10.1103/PhysRevB.92.100403)

⑪. (査読有) Yasuyuki Kato, and Shigeki Onoda, Numerical evidence of quantum melting of spin ice: quantum-classical crossover, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 077202 (2015)

(DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.077202)

⑫. (査読有) Ippei Danshita, Daisuke Yamamoto, and Yasuyuki Kato, Cubic-quintic nonlinearity in superfluid Bose-Bose mixtures in optical lattices: Heavy solitary waves, barrier-induced criticality, and current-phase relations, *Phys. Rev. A* **91**, 013630 (2015)

(DOI: 10.1103/PhysRevA.91.013630)

⑬. (査読有) Rodrigo A. Muniz, Yasuyuki Kato, and Cristian D. Batista, Generalized spin-wave theory: Application to the bilinear-biquadratic model, *PTEP* **083I01** (2014)

(DOI: 10.1093/ptep/ptu109)

[学会発表] (計 18 件)

- ①. 加藤康之, 紙屋佳知, 那須讓治, 求幸年, “ハイパーノナゴン格子キタエフ模型の基底状態解析”, 日本物理学会「第73回年次大会(2018年)」, 2018/3, 「東京理科大学 (千葉・野田)」
- ②. 加藤康之, “ハイパーノナゴン格子キタエフ模型の異方極限における3次元カイラルスピン液体への有限温度相転移”, 研究会「第二回 量子スピン液体研究の新展開」, 2017/12, 「東京大学 (東京・文京)」
- ③. 加藤康之, 紙屋佳知, 那須讓治, 求幸年, “3次元カイラルスピン液体への有限温度相転移: ハイパーノナゴン格子キタエフ模型の異方極限におけるモンテカルロシミュレーション”, 日本物理学会「秋季大会」,

2017/9, 「岩手大学 (岩手・盛岡)」

- ④. 加藤康之, 求幸年, “正四角台塔系が示す強誘電性を伴う電気磁気効果の理論的研究”, 日本物理学会「秋季大会」, 2017/9, 「岩手大学 (岩手・盛岡)」
- ⑤. Yasuyuki Kato, Yoshitomo Kamiya, Joji Nasu, Yukitoshi Motome, “Chiral Spin Liquids at Finite Temperature in a Three-Dimensional Kitaev Model”, Junjiro Kanamori Memorial International Symposium, 2017/9, 「東京大学 (東京・文京)」
- ⑥. Yasuyuki Kato, Yoshitomo Kamiya, Joji Nasu, Yukitoshi Motome, “Finite-temperature phase transition to chiral spin liquids in anisotropic hypernonagon Kitaev models”, SPICE-Workshop Topology Matters, 2017/7, 「Mainz (Germany)」
- ⑦. Yasuyuki Kato, Yoshitomo Kamiya, Joji Nasu, Yukitoshi Motome, “Finite-temperature phase transition to chiral spin liquids in anisotropic hypernonagon Kitaev models”, SCES 2017, 2017/7, 「Prague (Czech Republic)」
- ⑧. 加藤康之, 木村健太, 三宅厚志, 徳永将史, 松尾晶, 金道浩一, 赤木暢, 萩原政幸, 世良正一, 木村剛, 求幸年, “正四角台塔系における磁気秩序の多極子分解と電気磁気応答”, 日本物理学会「第72回年次大会 (2017年)」, 2017/3, 「大阪大学 (大阪・豊中)」
- ⑨. 加藤康之, 木村健太, 三宅厚志, 徳永将史, 松尾晶, 金道浩一, 赤木暢, 萩原政幸, 世良正一, 木村剛, 求幸年, “反強磁性カイラル正四角台塔系 $\text{Ba}(\text{TiO})\text{Cu}_4(\text{PO}_4)_4$ の磁化曲線と電気磁気効果”, 量子スピンの研究会, 2016/12, 「福井大学 (福井・福井)」
- ⑩. 加藤康之, 木村健太, 三宅厚志, 徳永将史, 松尾晶, 金道浩一, 赤木暢, 萩原政幸, 世良正一, 木村剛, 求幸年, “反強

磁性カイラル正四角台塔系 $\text{Ba}(\text{TiO})\text{Cu}_4(\text{PO}_4)_4$ の磁化曲線と電気磁気効果”, 日本物理学会「秋季大会」, 2016/9, 「金沢大学 (石川・金沢)」

- ⑪. Yasuyuki Kato, K. Kimura, A. Miyake, M. Tokunaga, A. Matsuo, K. Kindo, M. Akaki, M. Hagiwara, M. Sera, T. Kimura, and Y. Motome, “Magnetoelectric Behavior from Asymmetric Unit and Chiral Twist in Antiferromagnetic Square Cupolas”, HFM 2016, 2016/9, 「Taipei (Taiwan)」
- ⑫. 加藤康之, 三澤貴宏, “ J_1 - J_2 横磁場イジング模型における量子三重臨界点の量子モンテカルロシミュレーション”, 東大物性研短期研究会「スピン系物理の深化と最前線」, 2015/11, 「東大物性研究所 (千葉・柏)」
- ⑬. 加藤康之, 三澤貴宏, “横磁場イジング模型における量子三重臨界点: 量子モンテカルロ法を用いた解析”, 日本物理学会「秋季大会」, 2015/9, 「大阪市立大学 (大阪・住吉)」
- ⑭. Yasuyuki Kato, “Quantum Monte-Carlo study on quantum magnets with a single ion cubic anisotropy”, SPICE-Workshop on Computational Quantum Magnetism, 2015/5, 「Mainz (Germany)」
- ⑮. 加藤康之, 川島直輝, “立方磁気異方性のある量子磁性体の量子モンテカルロシミュレーション: 磁気秩序の消失”, 日本物理学会「第70回年次大会 (2015年)」, 2015/3, 「早稲田大学 (東京・新宿)」
- ⑯. 加藤康之, “二成分ボーズ・ハバード模型の量子三重臨界点と表面臨界性”, 第4回強相関電子系理論の最前線, 2014/12, 「勝浦観光ホテル (和歌山県・東牟婁郡)」
- ⑰. 加藤康之, 小野田繁樹, “量子スピンアイス模型の量子モンテカルロシミュレーション: 非閉じ込めスピノン, ヒッグス閉じ込め転移, 2つのクロスオーバー”, 日本

物理学会「秋季大会」, 2014/9, 「名古屋大学 (愛知・名古屋)」

- ⑱. Yasuyuki Kato, “Quantum Monte-Carlo study of deconfined bosonic spinons, a Higgs-confining transition, and two crossovers in quantum spin ice”, New Horizon of Strongly Correlated Physics 2014, 2014/6, 「東大物性研究所 (千葉・柏)」

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]
該当なし

6. 研究組織

研究代表者

加藤 康之 (KATO, Yasuyuki)

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号 : 50708534