Paul Sabatier 大学での長期滞在報告

物理学専攻 修士課程2年 毛利宗一朗 2013年10月17日から12月17日までの2ヶ月間、MERITの長期海外派遣を利用して フランスのToulouseにある Paul Sabatier大学を訪問した。私は修士課程で、1次元量子 スピン系の量子相転移の研究を行っている。Paul Sabatier大学のIRSAMC理論物理部門、 強相関系では Didier Poilblanc 教授、Pierre Pujol 教授をはじめとして、量子スピン系の研 究が盛んであり、私にとっては最高の訪問先であった。P. Pujol 教授は私の指導教官である 押川正毅教授の共同研究者であり、今回の私の訪問の受け入れを快く引き受けてくださっ た。

私の研究している量子スピン系は磁性体を記述するモデルであり、系の性質に本質的な 自由度をのみを取り出しており比較的扱いやすいため、古典力学では説明できない新しい 現象を理解する上で最初に考えるモデルとして適切である。近年、スピン液体やネマティ ック相といった系が注目されている。これらの相は古典的な磁気秩序を持たないため、ど のようにこれらの相を特徴づけるか、どのような格子モデルで実現するのか、実験的に同 定するには何をみればよいかなどといった点から盛んに研究されている。

古典力学で説明できない現象は、量子ゆらぎが特に重要になる空間の次元が小さい系で 現れやすい。1 次元系では Tomonaga-Luttinger 液体や Haldane 相などがその典型例であ る。Haldane 相は Valence Bond Solid (VBS) 描像でよく理解される。これは、大きさ Sのスピンを対称化した 2S個の大きさ 1/2 のスピンを用いて表そうというものである。例え ば、1 次元 S=1の Haldane 相は典型的には下図のような VBS 状態として理解できる。下 図においては黒丸が S=1/2のスピンを、大きい白丸が各サイトで S=1/2のスピンを対称化 し、S=1のスピンをつくる操作を表している。

今回の訪問で、我々は D. Poilblanc 教授の提案により、この S=1 の VBS 状態を並べて、 空間が 2 次元の系に拡張することを考えた。下図のような縦方向に並べた VBS 状態と横方 向に並べた VBS 状態が考えられる。我々は、この 2 つの VBS 状態を基底状態として含む ようなモデルを考え、中間の領域で何が起こるかを調べるためにテンソルネットワークに 基づいた数値計算を行っている。



テンソルネットワークは量子多体系を扱う1つの手法である。普通、量子状態を表すには 適当な基底をとり、その係数を与えることで表現する。一般に、この基底の数は系のサイ ズと共に指数関数的に増大するために、量子多体系の扱いは難しい。一方、テンソルネッ トワークでは各サイトに割り当てられたテンソルをつなぐことで状態を表現する(下図は 正方格子上のテンソルネットワークの例)。このような新しい状態の表し方であるテンソ ルネットワークを用いることで、新たな解析的・数値的な手法が可能になる。テンソルネ ットワークに基づいた数値計算手法には、密度行列繰り込み群法、infinite Time-Evolving Block Decimation(iTEBD)、Projected Entangled Pair States(PEPS)などがあり、成功を 収めている。もちろん、これらの手法も万能ではないが、有効な適用範囲が既存の方法と は異なっており、どのような状況で精度良く計算できるかがよく理解されている。具体的

には、量子多体系の状態空間の次元は系のサイズと ともに指数関数的に増大するが、低エネルギーの物 理で実際に重要になる状態はそのごく一部である。 そこで、テンソルネットワークは状態空間のうち、

「面積則」を満たす部分のみを取り出す変分試行状 態になっている。



また、テンソルネットワークは単に数値計算に便利な道具というだけでなく、量子多体 系の新たな側面を見出す。すなわち、テンソルネットワークによる状態の表現はエンタン グルメントと相性がよい。近年、量子情報を物性物理に応用し、量子相の新たな特徴付け をしようという試みがなされている。例えば、スピン液体は局所的な秩序が無いことが定 義という消極的な特徴づけしかなされていなかったが、エンタングルメントを用いること で、積極的な特徴付けが提案されている。

D. Poilblanc 教授のグループは PEPS を用いた数値計算で先駆的な研究を行っている。 今回の訪問で、D. Poilblanc 教授やその学生である T. Picot 氏に PEPS について教えていた だけたことは非常に有益であった。今回の研究では、T. Picot 氏が 2 次元系を PEPS で、私 が端のあるはしご系を iTEBD で計算している。足の数が 2,3 本のはしご系では 2 つの VBS 状態は相転移なくつながることが分かった。今後は、足の数を増やしていき、特に端状態 の振る舞いについて調べていく予定である。

訪問の機会を与えてくださった MERIT、訪問先を紹介してくださった押川正毅教授、受け入れを快く引き受けてくださり滞在中の面倒をみてくださった P. Pujol 教授をはじめ、滞在中に議論等に付き合ってくださった研究所の皆様に感謝致します。私にとって、今回の訪問が初めての海外であり、出国前は不安でありましたが、研究所の皆様の助けもあり、充実した2ヶ月間を過ごすことができました。



Toulouse の中心にある Capitole 広場

Report on my stay at Paul Sabatier University

Department of Physics, 2nd year in master course, Soichiro Mohri I have visited Paul Sabatier University in Toulouse, France from October 17th to December 17th supported by long-term overseas dispatch of MERIT. I am studying quantum phase transitions of 1-dimensional quantum spin systems in master course. In the laboratory of theoretical physics at Paul Sabatier University, many members including Prof. Didier Poilblanc and Prof. Pierre Pujol are actively studying quantum spin systems, so Paul Sabatier University is one of the best places for me.

Quantum spin systems describe magnets. These models only take into account the important degrees of freedom, so quantum spin systems are easier to treat and suitable as the first step to understand new phenomena which classical mechanics can't explain. Recently, quantum spin liquids and nematic phases attract attention. These phases don't have classical magnetic order. Therefore, we need to consider what the order of these phases are, in which models these phases can be stabilized and how to identify these phases experimentally.

Phases which classical mechanics can't explain often appear in low-dimensional quantum systems, because quantum fluctuations are important. In 1-dimensional systems, Tomonaga-Luttinger liquids and Haldane phases are typical examples. We can understand Haldane phases using Valence Bond Solid (VBS) picture. In VBS picture, we represent spin-S as symmetrized 2S spin-half. For example, the following figure show 1-dimensinal S=1 VBS state which is a representative state of Haldane phase. In this figure, filled circles indicate spin-half and open big circles indicate symmetrization operation at each site to make spin-1.

Prof. D. Poilblanc suggest extending this 1-dimensional S=1 VBS state to 2-dimensional system. In following figure, we show two different VBS states. We are considering model which have these two VBS states as ground states, and searching intermediate phase between two VBS states using numerical calculation based on tensor network.



Tensor network is one of the methods to treat quantum many-body systems. Usually, we take some bases and give their coefficients to represent quantum states. Generally, the number of these bases increases exponentially, so it is difficult to treat quantum many-body systems. On the other hand, in tensor network, we use tensors at each site to represent quantum states. Based on tensor network, we can use new analytical and numerical methods such as density matrix renormalization group, infinite time-evolving block decimation (iTEBD), projected entangled pair states (PEPS) and so on. Of course, these methods also have the limitations, but the accuracy of calculations becomes better in different situations from the other methods. Concretely, the

dimensions of the state spaces of quantum many-body systems increase exponentially, but the only small subsets of the state spaces are important in low temperature physics. In tensor network methods, we only keep the states which satisfy "area law".



Tensor network is not only useful method of numerical calculations but also useful concept to understand quantum many-body systems. Tensor network is good at knowing entanglement of quantum states. Recently, quantum information theory is used in condensed matter physics to characterize quantum phases. For example, conventional definition of spin liquids is the lack of magnetic order, but we can find positive definition of spin liquids using entanglement.

The group of Prof. D. Poilblanc is actively studying with PEPS. It is very beneficial for me to learn PEPS from Prof. D. Poilblanc and his student Mr. T. Picot in this stay. In our work, Mr. T. Picot is calculating 2-dimensinal system with PEPS, and I am calculating ladder systems which have edge with iTEBD. We found that there are no phase transition between two VBS states in 2- and 3-leg ladder systems.

I appreciate financial support of MERIT, Prof. Masaki Oshikawa introducing Toulouse to me, Prof. Pierre Pujol accepting and helping me during my stay in Toulouse, and other members in the laboratory discussing with me.



Place du Capitole in the center of Toulouse