

# 非磁性自由度由来の量子臨界現象の新奇ユニバーサリティの構築

## Construction of a novel universality for quantum critical points driven by nonmagnetic degrees of freedom

東京大学

派遣期間

研究機関

研究指導者

服部 一匡

2013年7月1日～2014年5月31日

Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln,  
Zùlpicher Str., 77, D-50937 Köln, Germany

Prof. Achim Rosch

We have analyzed systems where some non-magnetic degrees of freedom play important roles in strongly correlated electron systems. The first one is constructing a new algorithm of continuous-time quantum Monte Carlo method for quantum impurity problems in Tomonaga-Luttinger liquids. Using our new method, we have calculated various dynamical response functions such as electron's Green function in this system for the first time. The method can also be applied to the Kondo type problem and we have analyzed the scaling properties for the two models. The other one is a quantum critical theory for nematic or quadrupole fluctuation coupled with acoustic phonons. Nonmagnetic nematic fluctuations inevitably couple with lattice degrees of freedom, that is, phonons. We have developed a new critical theory for the coupled fluctuations and discussed its thermodynamic and transport properties. The typical aspect of the present theory is that the phonons along particular directions in the first Brillouin zone become soften near the critical point and these directions are related to the symmetry of nematic order parameter. These soft modes strongly influence the low-energy and the low-temperature properties of the systems.

### 研究目的

凝縮系固体物理学での量子多体系においては、その低エネルギーの物理現象が本質的に非相関系では考えられない新しいものである可能性があり、そのような現象を発見、解明する事が大きな目標である。これらは例えば非従来型の超伝導であり、分数量子ホール効果といった現象である。しかしながら、量子多体系において厳密な理論を構成する事は特殊な場合を除いて一般には非常に困難である。そのために、現象の本質的な部分を抜粋し低エネルギー有効理論を構築したり、数値的には厳密な数値計算の手法を開発することが非常に重要になってくる。

本研究では特に近年注目を集めている nematic 等の非磁性自由度に着目し、ドイツ、ケルン大学理論物理学研究所において研究を行った。

第一の研究課題は一次元 Tomonaga-Luttinger liquid (TLL)中の不純物効果についてである。TLLの中に非

磁性不純物を入れると、その不純物による電子の散乱効果がどんなに小さくても、(クーロン相互作用のように電子-電子相互作用が斥力の場合には)絶対零度においてはその不純物散乱が一次元の細線を二つに分断することが理論的に知られている。このモデルは Kane-Fisher 模型[1]とよばれ、これに類似の系は1990年代から盛んに研究されているが、電子の状態密度に対応する動的相関関数(グリーン関数)についてはその知見は近似的な理論が存在するだけである。本研究では、近年強相関電子系において開発された連続時間モンテカルロ法[2]をこれらの一次元系に拡張する事を目指した。また、コンダクタンスやその他の物理量についても数値的に厳密な結果を得ることを目的とした。

第二の課題は電気四極子と呼ばれる自由度の臨界理論の構築である。電気四極子は例えば Pr 等を含む f 電子系化合物[3]において基底状態が非磁性二重項

の場合に発現する非磁性の自由度である。最近の流行では **nematic** と呼んだりする事もある（これは磁気双極子のように「向き」を持たない自由度であるためである）。電気四極子は磁気双極子と異なり、他の非磁性自由度と線形に結合することが期待され、臨界理論はそれら全てが「混ざった」ものにならざるを得ない。このような状況の有効理論はモット金属絶縁体転移における縦波フォノンとの結合と似た状況にあり[4]、電気四極子の場合はその異方的な場合への拡張になっていることが期待できる。

## 研究経過

第一の課題については、滞在先の Rosch 教授とともに 2013 年 8 月ごろから本格的に着手した。Kane-Fisher 模型に対する連続時間量子モンテカルロ法のアルゴリズム自身は早い段階で完成し終わったのは良かったが、プログラムコード実装後、厳密解が得られる極限での数値解と厳密解との比較をする段階で困難に陥った。およそ 1 ヶ月半の試行錯誤の末、これは数値計算に必要な「短距離の切断」の取り方に起因していることが判明した。しかしながら、災い転じて、この困難克服の過程において、モンテカルロ法のアルゴリズムを高速化するためのブレークスルーがあった。

TLL では一次元の相互作用する電子系はボゾン化法を適用し相互作用しないボゾン系で記述される。そのため、当初は全てモンテカルロのアルゴリズムはボゾン系の表式で記述していた。しかし、計算過程で必要になるバーテックス演算子の多点相関関数の表式は、上記の「短距離の切断」が小さい極限において、電子系の表式になる事に気づかされた。この関係を考慮する事により、上記の困難は完全に切り除かれ、かつ副産物として、電子系の表式を用いる事でこれまでに培われてきた高速更新の手法を適用することが可能になり、計算速度の向上およびプログラムコードの簡易化に成功した。11月頃からは、上記 Kane-Fisher 模型の数値計算を行いつつ、さらなる拡張として、動的な内部自由度をもつ Kondo 模型に対する方法を開発し、冬にかけてそれらの模型に関する詳細な解析を行った。また3月末から四月にかけて開催されたドイツ物理学会において、その研究結果を発表した。

第二の課題は Rosch 教授とともにケルン大学の Garst 講師および大学院生の Max 氏との共同研究と

して第一の課題と平行して行った。Garst 講師は上記縦波フォノンと結合したモット金属絶縁体転移の臨界理論[4]の提唱者でもある。まず我々は Pr 化合物[3]で実現している四極子に関する理論を構築することを考えた。これらの物質は立方晶系の物質であり、その場合の四極子は E または  $E_g$  表現と呼ばれ、二次元表現である。この「二次元」という事実がフォノンと結合しない場合にも非常に珍しい理論体系を要請し、得られた有効作用は従来のものと異なり、非常に興味深いものであった。しかしながら、議論を進めるうちに、その「二次元」性は相転移の一般論として一次転移を誘発する事が判明した。そのため、実際の実験データは二次転移のように振る舞っているが[3]、二次の連続転移を基礎とした議論は土台となる仮定にパラメータの詳細な調整が必要となるため、異なる系を解析する事に方針を変更した。

上記対象物質が変わる系は正方晶系の四極子の系で、この場合は、四極子自由度が一次元表現である。同様の解析を実行し、有効作用を書き下し、四極子と結合するフォノンモードの同定等をし終わった頃に渡航期間が終わってしまい、現在研究を継続している所である。

## 考察

ここではすでに研究が完了している第一の課題についての結果の詳細を述べる。

まず本研究で開発したモンテカルロ法の優れている点を列挙する。

- ① ボゾン化法により電子-電子相互作用を厳密に取り込む事が可能である。
  - ② すくなくとも扱った2つの模型では量子モンテカルロ法の天敵である負符号問題がない。
  - ③ プログラムコードは電子系のものから容易に拡張可能である。
  - ④ さまざまな動的物理量が計算可能である。
- ②に関しては一般の模型に適用する場合には負符号がでる可能性があるため注意が必要である。

Kane-Fisher 模型に関しては主に電子グリーン関数  $G(t)$  を求めた。その長時間（虚時間）極限での振る舞いは  $G(t) \sim 1/t^{1/2g}$  となり近似計算による結果が正しい事が示された。ここで  $g$  は TL parameter と呼ばれる電子-電子相互作用を表わすパラメータである。また、 $G(t)$  のスケール関数  $F(tT^*, T/T^*) = G(t)/G_0(t)$  についても解析した(Fig.1 参照)。ここで、 $T$  は温度、

$T^*$ は不純物ポテンシャルに依存する系の特徴的な温度である。また  $G_0(t)$ は不純物がない場合の電子グリーン関数である。数値計算の結果は  $F(tT^*, T/T^*)$ が確かに  $tT^*$ と  $T/T^*$ 関数であることをしめしており、これによって、この系において初めて電子グリーン関数のユニバーサルスケーリング関数が確認された。これらのデータから、局所電子状態密度の振動数スペクトルを計算することが可能になり、今後の発展が期待できる。また近藤模型の解析では、スピン感受率の  $t$  依存性  $\sim 1/t^{2g}$  や帯磁率の温度依存性  $\sim T^{2g-1}$  を数値的に厳密に計算する事に成功した。

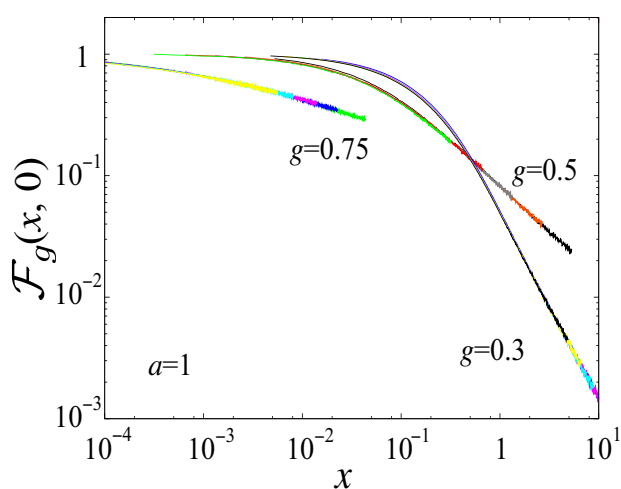


Fig.1: Scaling function for the electron Green's function in the Kane-Fisher model as a function of  $x=tT^*$  at  $T=0$ . The short distance cut off is set to  $a=1$ . The data with different colors mean the data are taken for different coupling constants, and thus, different  $T^*$ .

## 参考文献

- [1] C. L. Kane and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220 (1992).
- [2] E. Gull et al., Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
- [3] A. Sakai and S. Nakatsuji, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 063701 (2011).
- [4] M. Zacharias et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 176401 (2012).

## 研究の発表

口頭発表

1. "Continuous-time quantum Monte Carlo approach for quantum impurity problems in Tomonaga-Luttinger liquids,"  
K. Hattori and A. Rosch,  
Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG) spring meeting 2014, Dresden, Apr. 2, 2014.

誌上発表

1. "Quantum impurity in a Tomonaga-Luttinger liquid: Continuous-time quantum Monte Carlo approach,"  
K. Hattori and A. Rosch,  
Phys. Rev. B **90**, 115103 (2014).