

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2006～2008

課題番号：18740234

研究課題名 (和文)

ノボトニー法による高次元系の転送行列の構成と応用－DMRG的な利点を高次元系へー

研究課題名 (英文)

Novotny's transfer matrix method for the high dimensional systems : An extension of DMRG

研究代表者

西山 由弘 (NISHIYAMA YOSHIHIRO)

岡山大学・大学院自然科学研究科・助教

研究者番号：60294401

研究成果の概要： 数値計算手法には、大別すると、対角化法とモンテカルロ法がある。一般に、高次元では、対角化法は、あまり有効ではない。本研究では、その不得手を克服し、高次元でも対角化が有効で、かつ、その利点を発揮できるようなスキームを構築する。段階的にノウハウを蓄積し、最終的に、意欲的な課題に挑む。動的性質および量子的性質の解析、がそれである。すなわち第一に、三次元イジング模型のマグノンの引力による束縛状態の解析を行った。この課題はまさに、モンテカルロ法が不得手な課題であり、本研究手法の利点が最大限に発揮される分野である。第二に、量子二次元 XY 模型の臨界現象の解析を行った。これは、やや、モンテカルロと競合する研究領域である。とはいえ、方法論的に、量子系に拡張可能であることをデモンストレーションしたという価値がある。

## 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	600,000	0	600,000
2007 年度	500,000	0	500,000
2008 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	1,600,000	150,000	1,750,000

研究分野：統計力学

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：統計物理学、物性基礎論、計算物理学

## 1. 研究開始当初の背景

数値シミュレーションには、大別してモンテカルロ法と対角化法とがある。しかしながら、対角化法は、高次元の問題に対しては有効では無かった。いうまでもなく、対角化には、その固有な利点を持っている。その利点を高次元で発揮することが出来れば、極めてユニークで、かつ、唯一無二の研究成果を、安定に、システムティックに達成することができ

る。

## 2. 研究の目的

上述のように、幸いにも、本手法が開発されれば、かなり、有利な立場で、ユニークなアプローチを系統的に展開できる。すなわち、現在まで、モンテカルロ法が不得手なため等閑にふされてきた、積年の問題、フラストレーション、電子系、動的な問題、クラスターアルゴリズムと

相性の悪い相互作用と言った、課題を一網打尽に攻略できる。その為に、本研究では、主として、方法論の整備とノウハウの蓄積に重点を置く。取っ掛かりとして、やや陳腐だが、確立している話題、イジング模型やその臨界現象といった問題に適用して、そのパフォーマンスをデモンストレーションすることに取り組んだ。

### 3. 研究の方法

本研究は、方法論の整備自体が目的となる。よって、上述の項目が、まさに、研究手法を構成する。より敷衍した説明を展開する。数値対角化とは、主として、ランチョス法により、(ハミルトニアンや転送行列)といった巨大な行列を線形代数に基づいて処理することを言う。その処理が完了した後も、物理量の吟味に手間を要することがあるが、本質的には、その困難はその前段部の処理に準ずる。本研究では、その巨大行列の構成を、高次元においても、効率的かつ系統的に遂行するためノボトニーの方法を採用する。元来、ノボトニーの方法は、イジング模型に対して開発された。従って、本研究では、それを改良するとともに、一般化を施して汎用性を持たせる。

### 4. 研究成果

ノボトニーの方法を、量子 XY 模型に拡張する事が出来た。(2+1)次元系に対して、具体的なデータを示した。その計算の信頼性は、臨界指数のデータによって、裏書きされた。さらに、3次元のイジング模型のマグノンの束縛エネルギーを 1.84 と見積もった。この結果は、この方法論の利点を最大に発揮して得られたものである。この結果により、ついに、本研究は、方法論の開発を離陸して、新分野の開拓に乗り出すことが出来た。

### 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 6 件)

以下の論文はすべて、査読ありのものである。

① Yoshihiro Nishiyama, Numerical diagonalization analysis of the criticality of the (2+1)-dimensional

XY model: Off-diagonal Novotny's method, Phys. Rev. E 78, (2008) 021135--1-7.

② Yoshihiro Nishiyama, Bound-state energy of the three-dimensional Ising model in the broken-symmetry phase: Suppressed finite-size corrections, Phys. Rev. E 77 (2008) 051112--1-5.

③ Yoshihiro Nishiyama, Multicriticality of the (2+1)-dimensional goniheric model: A realization of the (d, m)=(3, 2) Lifshitz point, Phys. Rev. E 75, (2007) 051116-1-8.

④ Yoshihiro Nishiyama, Finite-size scaling of the d=5 Ising model embedded in a cylindrical geometry: The influence of hyperscaling violation, Phys. Rev. E 75 (2007) 011106--1-7.

⑤ Yoshihiro Nishiyama, Eliminated corrections to scaling around a renormalization-group fixed point: Transfer-matrix simulation of an extended d=3 Ising model, Phys. Rev. E 74 (2006) 016120--1-7.

⑥ Yoshihiro Nishiyama, Transfer-matrix approach to the three-dimensional bond percolation: An application of Novotny's formalism, Phys. Rev. E 73 (2006) 016114--1-6.

[学会発表] (計 5 件)

① 西山由弘, 3D イジング模型の秩序相における素励起対のユニバーサルな束縛エネルギー、  
日本物理学会第 63 回年次大会、  
平成 20 年 3 月 23 日、近畿大学

② 西山由弘, (d, m)=(3, 2) 型リフシツ点の臨界性:  $d+1$  次元 goniheric 模型、  
日本物理学会第 62 回年次大会、  
平成 19 年 9 月 22 日、北海道大学

③ 西山由弘, d=5 イジング模型の有限サイズスケールリング: ハイパースケールリングの破れの影響、  
日本物理学会 2007 年春季大会、

平成 19 年 3 月 19 日、鹿児島大学

- ④ 西山由弘、繰り込み固定点付近での有限サイズスケール補正の軽減、日本物理学会 2006 年秋季大会、平成 18 年 9 月 23 日、千葉大学

[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]

なし

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

西山 由弘 (NISHIYAMA YOSHIHIRO)

岡山大学・大学院自然科学研究科・助教

研究者番号：60294401

### (2) 研究分担者

なし

### (3) 連携研究者

なし