

機関番号：12601

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008～2010

課題番号：20540364

研究課題名（和文） 長距離相互作用するスピン系の相転移とダイナミクスに関する研究

研究課題名（英文） Study on Phase Transitions and Dynamics of Spin System with Long-range Interactions

研究代表者

藤堂 真治 (TODO SYNGE)

東京大学・大学院工学系研究科・講師

研究者番号：10291337

研究成果の概要（和文）：長距離相互系では、スピン間の相互作用の数がスピン数の二乗に比例して増加するため、シミュレーションはこれまで大変困難であった。我々は一般の長距離相互作用系に対するオーダーNモンテカルロ法を開発した。また、モンテカルロ法における棄却率を最小化する一般的な手法を開発した。さらに、スピニアイスの低温状態やスピンパイエルス系における量子フォノンの効果を明らかにし、エンタングルメントエントロピーや局所 Z_2 ベリ一位相の測定方法を提案した。

研究成果の概要（英文）：It has long been very difficult to simulate spin systems with long-range interactions since the number of interactions increases proportional to the square of the number of spins. We have developed an Order-N Monte Carlo method for generic long-range interacting system. We have also developed a versatile algorithm, which minimizes the rejection rate in Monte Carlo method. In addition, we have revealed the low-temperature phase of the spin-ice and the effect of quantum phonon in spin-Peierls system, and proposed methods to measure the entanglement entropy and local Z_2 Berry phase.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：統計力学・物性基礎論

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：長距離相互作用、モンテカルロ法、詳細釣り合い条件、量子モンテカルロ法、エンタングルメントエントロピー、臨界現象、並列計算、負符号問題

1. 研究開始当初の背景

長距離相互作用を持つ系においては、短距離相互作用のみをもつ系とは全く異なった新しい秩序状態、臨界現象におけるユニバーサリティクラスの出現など、工学的な応用だ

けではなく、統計物理学・物性基礎論の立場からも、興味深い現象が期待される。しかしながら、計算機シミュレーションによる研究は、数少ない例外を除いてはごく小規模なものに留まっていた。これは、長距離相互作用

系のシミュレーションでは、一般的に粒子数(スピン数) N の二乗に比例した莫大な計算時間が必要となるためである。強磁性的な長距離相互作用のみをもつ場合には、オーダー $N \log N$ のアルゴリズムが既に提案されていたが、磁気双極子相互作用のような互いに競合する相互作用が存在する場合には有効ではなく、磁気双極子系の大規模シミュレーションを行うには、アルゴリズムの面からも大きなブレークスルーが必要とされた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、長距離相互作用する多体系、特に磁気双極子相互作用が支配的なスピン系における秩序状態や臨界状態などについて、新たな計算物理学的手法を開拓し、さらにそれを用いた大規模シミュレーションによりその特異な性質を明らかにすることにある。さらに、それに関連して、より効果的なモンテカルロ法を開発し、古典/量子多体系における非自明な物性現象を明らかにすることにある。

3. 研究の方法

新たなアルゴリズムを提案し、それに基づき効率的なライブラリ、アプリケーションプログラムを開発した。さらに並列計算機を用いて古典/量子スピン系の大規模シミュレーションを実行した。

4. 研究成果

(1) オーダー N モンテカルロ法の開発

スピン系における長距離相互作用は系の熱力学的状態や動力学的特性に大きな影響を及ぼすことが知られている。しかしながら、スピン間の相互作用の数がスピン数の二乗に比例して増加するため、何らかの近似なしに計算を実行することは困難であった。我々は一般の長距離相互作用系に対するオーダー N のモンテカルロアルゴリズムを開発した。この方法では相互作用のレンジ・系のサイズに依らず定数時間で個々のスピンのアップデートを行なうことができる。また、相互作用のカットオフ等の近似は一切用いておらず詳細釣合の条件を厳密に満たす。この特徴は、特に長距離相互作用系に現われる新しいユニバーサルティークラスを調べる場合に本質的である。

(2) スピンアイスの低温状態

オーダー N モンテカルロ法を用いて、イジング型パイロクロア酸化物である $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ や $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の数値計算を行った。この系は低温でマクロに縮退したスピンアイスの振舞

いを示すことが実験で報告されている。反強磁性的な交換相互作用よりも磁気双極子相互作用による最近接スピン間の強磁性的な相互作用が支配的となっており、これがスピンアイスの振舞いの起源である。我々はオーダー N モンテカルロ法を Wang-Landau 拡張アンサンブル法と組み合わせることにより、低温のエントロピーや秩序変数を精度良く求め、極低温においてもエントロピーはマクロに残ったままであることを明らかにした。

(3) 詳細釣り合いを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法の開発

長距離相互作用系に対するオーダー N 法の基礎となっているのは、Walker 法である。この Walker 法では幾何学的な埋め立ての方法を用いて、任意の分布にしたがった整数乱数を定数時間で生成することが可能となっている。我々はこの埋め立ての概念をマルコフ連鎖モンテカルロ法の遷移確率の決定に拡張することに成功した。この方法では、一般の重みについて棄却率を最小化することができる。さらには、詳細釣り合い条件を積極的に破ることにより、配位空間上に正味の確率流が導入され、従来のメトロポリス法や熱浴法に比べて大幅に緩和を加速することが可能となった。

(4) 粒子数の保存しない系に対する量子モンテカルロ法の開発とスピンパイエルス系への応用

スピンと格子の二つの異なった自由度が組み合わさった長距離相互作用系に対する効率的な量子モンテカルロアルゴリズム(ワープ・アルゴリズム)を開発した。さらにこのアルゴリズムを詳細釣り合いを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法を組み合わせることにより、より効率的な手法とすることに成功した。我々は、この新しい量子モンテカルロ法をスピンパイエルス系に応用し、二次元における新しいスピン液体状態の存在を示唆する結果を得た。また三次元において、リエントラント型の相転移が引き起こされることを明らかにした。

(5) 量子磁性体におけるトポロジカルな秩序
従来の強磁性的な反強磁性的な古典的長距離秩序以外の量子系特有のトポロジカルな秩序に注目が集まっている。トポロジカルな秩序を特徴付ける量として、エンタングルメントエントロピーや局所 Z_2 ベリー位相など、様々な新しい概念が提案されている。我々は高次元の量子磁性体に対して、定量的に精密に測定を行う量子モンテカルロ法を開発した。さらにこれらの新しい手法を用いて、エンタングルメントエントロピーの面積則など、理論的な予測の検証を行った。

(6) 量子モンテカルロ法の並列化とライブラリ開発

量子モンテカルロ法の OpenMP+MPI ハイブリッド並列化を進めた。さらに次世代スパコンなどの超並列計算機で効率的にシミュレーションを行うために必要となるライブラリを開発しオープンソースソフトウェアとして公開した。

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9件)

1. 諏訪秀磨, 藤堂真治, 詳細つりあいを満たさないモンテカルロ法, 日本物理学会誌 66 (2011) 370 (査読有).
2. B. Bauer, L. D. Carr, A. Feiguin, J. Freire, S. Fuchs, L. Gamper, J. Gukelberger, E. Gull, S. Guertler, A. Hehn, R. Igarashi, S.V. Isakov, D. Koop, P.N. Ma, P. Mates, H. Matsuo, O. Parcollet, G. Pawłowski, J.D. Picon, L. Pollet, E. Santos, V.W. Scarola, U. Schollwöck, C. Silva, B. Surer, S. Todo, S. Trebst, M. Troyer, M.L. Wall, P. Werner, S. Wessel, The ALPS project release 2.0: Open source software for strongly correlated systems, J. Stat. Mech. (2011) P05001 (査読有).
3. A. van Rynbach, S. Todo, and S. Trebst, Orbital ordering in e_g orbital systems: Ground states and thermodynamics of the 120 degree model, Phys. Rev. Lett. 105 (2010) 146402 (査読有).
4. H. Suwa and S. Todo, Markov Chain Monte Carlo Method without Detailed Balance, Phys. Rev. Lett., 105 (2011) 120603 (査読有).
5. D. Yamamoto, S. Todo, and S. Kurihara, Green's function theory for spin-1/2 ferromagnets with an easy-plane exchange anisotropy, Phys. Rev. B 78 (2008) 024440 (査読有).
6. S. Todo and A. Shibasaki, Improved chain mean-field theory for quasi-one-dimensional quantum magnets, Phys. Rev. B 78 (2008) 224411 (査読有).
7. K. Fukui and S. Todo, Order-N Cluster Monte Carlo Method for Spin Systems with Long-range Interactions, J. Comp. Phys. 228 (2009) 2629 (査読有).
8. K. Yamamoto, S. Todo, and S. Miyashita,

Successive phase transitions at finite temperatures of the supersolid in the three-dimensional extended Bose-Hubbard model, Phys. Rev. B 79 (2009) 094503 (査読有).

9. H. Yamaguchi, S. Kimura, Z. Honda, K. Okunishi, S. Todo, K. Kindo, and M. Hagiwara, High-Field Magnetism of the Spin-Ladder Material $\text{Na}_2\text{Fe}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_2$, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 124701 (査読有).

[学会発表] (計24件)

1. **S. Todo**, Order-N Monte Carlo Method for Long-range Interacting Systems and its Applications, STATPHYS24 XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics, 2010/7/20, Cairns, AUSTRALIA
2. H. Suwa and **S. Todo**, Quantum Monte Carlo method for particle number non-conserved systems and application to spin-Peierls systems, STATPHYS24 XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics, 2010/7/22, Cairns, AUSTRALIA
3. H. Suwa and **S. Todo**, Markov Chain Monte Carlo without Detailed Balance and Bounce-free Worm Algorithm, Monte Carlo Algorithms in Statistical Physics, 2010/7/27, Melbourne, AUSTRALIA
4. **S. Todo**, Quantum Monte Carlo Measurement of Entanglement Entropy, NTTCM2010 Japan-Switzerland Joint Workshop New Trends in Theory of Correlated Materials, 2010/9/8, Chiba
5. **S. Todo**, Markov chain Monte Carlo without Detailed Balance, APCC11 The 11th Asia Pacific Physics Conference, 2010/11/18, Shanghai, CHINA

6. 藤堂眞治, 大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper, 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 第5回公開シンポジウム, 2011/2/22, 神戸
7. S. Todo, QMC Challenges for Spin/bosonic Lattice Models, The Next Generation of Quantum Simulations, 2009年5月3日, Moorea
8. 藤堂眞治, 量子モンテカルロ法の大規模並列化, 次世代ナノ情報機能・材料分野公開研究会「新物質とエネルギー」, 2010年3月11日, 東京
9. 諏訪秀麿, 藤堂眞治, スピンパイエルス系における非磁性不純物効果 2, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月22日, 岡山
10. 松尾春彦, 藤堂眞治, 量子モンテカルロ法による量子クロック模型のステップネスの計算, 日本物理学会第65回年次大会. 2010年3月22日. 岡山
11. 本山裕一, 藤堂眞治, フラストレーションした量子反強磁性ハイゼンベルグ模型のモンテカルロ法, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月22日, 岡山
12. 藤堂眞治, Wang-Landau 法によるエンタングルメントエントロピーの計算, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月22日, 岡山
13. S. Todo, "Large-scale parallel quantum Monte Carlo simulation of low-dimensional quantum magnets", 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, 2008/6/6, 東京
14. 藤堂眞治. 長距離相互作用を持つスピ
ン系の拡張アンサンブルモンテカルロシミュレーション. 日本物理学会 2008年秋季大会, 2008/9/22. 盛岡
15. 諏訪秀麿, 藤堂眞治, スピンパイエルス系における格子の分散関係と次元性の効果
16. 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008/9/22. 盛岡
17. S. Todo, "Order-N Monte Carlo Algorithm for Long-range Interacting Spin Systems: Application to Dipolar Spin Ice". International Workshop on Novel Aspects of Phase Transitions with Long-range Interactions, 2008/10/28, 東京
18. S. Todo, "Low-energy Properties of Frustrated Ising Magnets with Competing Exchange and Dipole Interactions", Supercomputing in Solid State Physics 2009, 2009/2/18, 柏
19. 藤堂眞治, ダイポールスピニアイスの長距離秩序相, 日本物理学会第64回年次大会, 2009/3/30, 東京
20. 松尾春彦, 藤堂眞治, 量子モンテカルロ法による古典 2 次元クロック模型の解析, 日本物理学会第64回年次大会, 2009/3/30, 東京
21. 諏訪秀麿, 藤堂眞治, 量子数の保存しない系に対する量子モンテカルロ法とスピンパイエルス系への応用, 日本物理学会第64回年次大会, 2009/3/30, 東京
22. 金井龍一, 藤堂眞治, 量子モンテカルロシミュレーションによるエンタングルメントエントロピーの計測, 日本物理学会第64回年次大会, 2009/3/30, 東京

〔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〕

ホームページ等

<http://todo.ap.t.u-tokyo.ac.jp>

<http://alps.comp-phys.org>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤堂 眞治 (TODO SYNGE)

東京大学・大学院工学系研究科・講師

研究者番号：10291337

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者