

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 13 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540450

研究課題名(和文) テンソルネットワーク変分法を用いた量子フラストレーション系の数値的研究

研究課題名(英文) Numerical study of quantum frustrated systems by tensor network methods

研究代表者

原田 健自 (Harada, Kenji)

京都大学・情報学研究科・助教

研究者番号：80303882

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文)：エンタングルメント繰込みに基づくMERAテンソルネットワークを三角格子上に構築し、有機絶縁体の有効モデルの一つである空間異方性のある三角格子上の反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態を計算した。その結果、空間異方性の弱い領域では従来提案されていた量子スピン液体状態よりも波数が非整合なスパイラル磁気秩序相が安定であることを数値的に明らかにした。また、ベイズ推定に基づく臨界現象のスケーリング解析手法や、非局所ユニタリー変換に基づくトポロジカル秩序に起因する負符号問題の解消法の提案を行い、磁性相とValence Bond Solid相間の量子相転移現象の大規模な数値的研究を行った。

研究成果の概要(英文)：We construct a new MERA tensor network based on entanglement renormalization for quantum triangular lattice models. We apply it to the ground state of an $S = 1/2$ antiferromagnetic Heisenberg model on a spatially anisotropic triangular lattice. Magnetic ground states are numerically confirmed in the weak anisotropic region. The magnetic structure is spiral with an incommensurate wave vector that is different from the classical one. We also develop a Bayesian method for the scaling analysis of critical systems, and a non-local unitary transformation for removing the negative sign problem in $SO(N)$ bilinear-biquadratic chains. We also confirm the systematic shift of universality class to a weak first-order transition from large-scale quantum Monte Carlo calculations of two-dimensional $SU(N)$ JQ models.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：テンソルネットワーク フラストレーション 量子スピン系 MERA スケーリング解析 ベイズ推定
トポロジカル秩序 非局所ユニタリー変換

1. 研究開始当初の背景

(1) 強相関系における未解明な量子状態、特に量子スピン液体状態の探求は物性理論研究の中心的課題の1つになっている。その様な探求の舞台の1つがフラストレーションのある量子多体系であり、 NiGa_2S_4 、有機化合物 **BET-TTF**、ボルボース石、ハーバースミス石、ベシニエ石等のさまざまなフラストレーション系の物質探索が続けられている。さらにこれらの物質群に対する物性実験も活発に行われており、新しい知見が日々蓄えられている。しかし、これらの量子フラストレーション系の理論的研究には困難があり、重要な問題が未解決のままの状態である。

(2) 量子フラストレーション系は、一般に平均場を超える解析的アプローチが困難であるだけでなく、計算物理学的な観点から見ても、既存の数値的手法を寄せ付けない。この事がフラストレーションのある量子多体系の理論的な解明を妨げている。例えば、強力な数値的手法である量子モンテカルロ法を適用しても、サンプリング確率が負になる事による桁落ちによって精度の高い結果を示す事は難しい(負符号問題)。このような問題を克服するために様々な新しい試みが行われてきたが未だに解決されていない。

2. 研究の目的

(1) 量子モンテカルロ法では負符号問題があったフラストレーションのある量子多体系に対して、エンタングルメント繰り込みを組み込んだテンソルネットワークに基づく数値的変分法等の手法を開発する。

(2) 既存の研究に比べて格段に大きな格子を取り扱う事で、フラストレーションと量子揺らぎが基底状態にどう影響を与え、平均場の解析等の従来の物性研究の結果がどう修正されるのかということに対する理解を深める。

3. 研究の方法

(1) 三角格子等の幾何学的フラストレーションをもつ格子上の量子モデルを数値的に精度よく取り扱う新手法の研究開発を行う。特に、エンタングルメント繰り込みを組み込んだテンソルネットワークの研究を行う。

(2) 幾何学的フラストレーションを生ずる格子上の反強磁性ハイゼンベルグモデル系の基底状態計算を行い、量子的ゆらぎとフラストレーションの両者によって生ずる絶対零度付近での秩序状態を解明する。

4. 研究成果

(1) 三角格子上の空間異方性のある反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態をエンタングルメント繰り込みを組み込んだ MERA テンソルネットワーク変分計算により明ら

かにした。対象とした系は、鎖間相互作用を持つ反強磁性ハイゼンベルグ鎖の集合(図1(a))であり、有機絶縁体の有効量子スピンモデルである。この系では、強い量子揺らぎと幾何学的フラストレーションのために、量子スピン液体相などのエキゾチックな相の出現が議論されてきた。我々の研究結果より、少なくとも等方的な場合を含む一定領域では、基底状態は長距離磁気秩序(図1(b)の MERA SP 相)を持ち、特にその波数は格子に非整合であるスパイラル相であることがわかった。

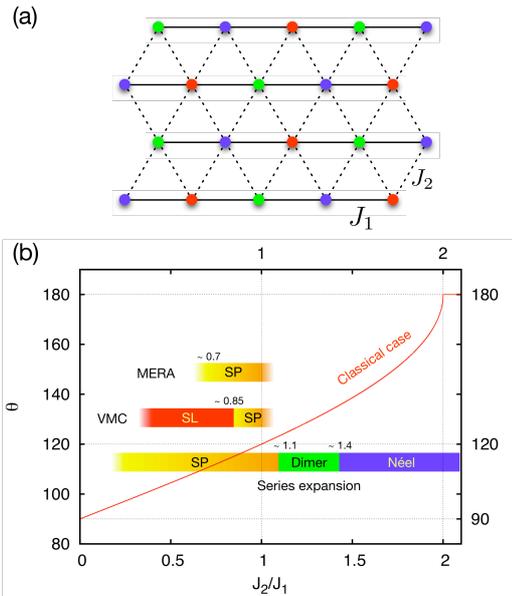


図1. (a)空間異方性のある三角格子上の反強磁性ハイゼンベルグモデル。(b)基底状態相図。

特に、鎖間相互作用定数 J_2 と鎖内相互作用定数 J_1 とした場合、領域 $0.7 < J_2 / J_1 \leq 1$ において、テンソルネットワーク変分法のエネルギーが従来法よりもよく、この領域の基底状態がスパイラル相にあることがわかった。波数は連続的に変化するが、古典的な場合と明らかに異なることもわかった(図2)。具体的には、量子ゆらぎが空間異方性の効果を高め、波数の変化が強まる。また、その波数は摂動展開で得られたものとよい一致を示すことがわかった。

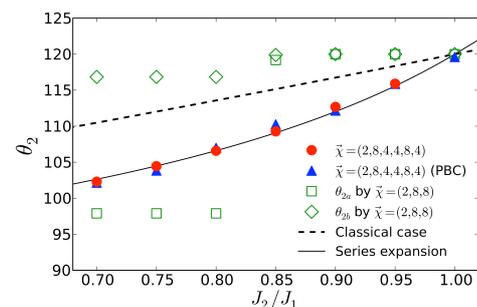


図2. 基底状態における有効磁気モーメントの鎖間角度。

(2) 三角格子系の為のテンソルネットワーク変分法で得られた変分エネルギーは、他手法で得られたエネルギーよりも、空間異方性が弱い領域でより低いことがわかった。ただし、空間異方性が強い領域においても、テンソルサイズを大きくすると系統的にエネルギー値は改善されることもわかった。この結果は、本研究で用いたエンタングルメント繰り込みテンソルネットワークが等方的なエンタングルメント構造を仮定していることと関係している (図3)。つまり、空間異方性を強めるとエンタングルメント構造の異方性も強まり、ミスマッチが起きた。このことから一般的にエンタングルメント構造をテンソルネットワーク形状に反映すれば、数値的に精度を高める事ができる事がわかった。

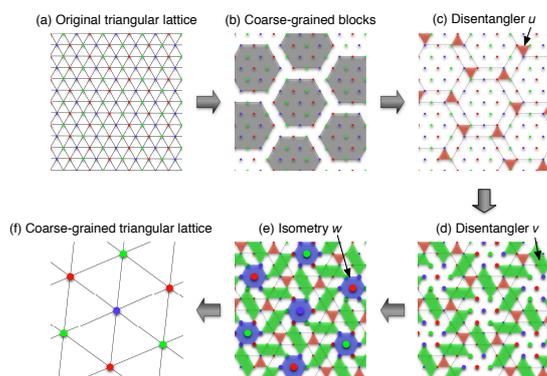


図3. 三角格子上的エンタングルメント繰り込みを組み込んだ MERA テンソルネットワーク。

(3) 秩序を表す物理量のパラメータ依存性に基つき相図を決定することは良く行われている。特に臨界現象を含む相図の場合は臨界点付近でユニバーサルに成立すると考えられているスケーリング則に基づく解析が重要な研究手法となっている。しかし、最小二乗法に基づく従来法は未知のスケーリング関数をパラメトリックなものとして扱う為に適用範囲が限定されていた。そこで、ベイズ推定の枠組みを用いた統計的手法を提案した。特に、ガウス過程回帰に基づく事でノンパラメトリックなスケーリング関数を扱う事が可能となり、スケーリング解析の手法の有効性を著しく高めた (図4)。

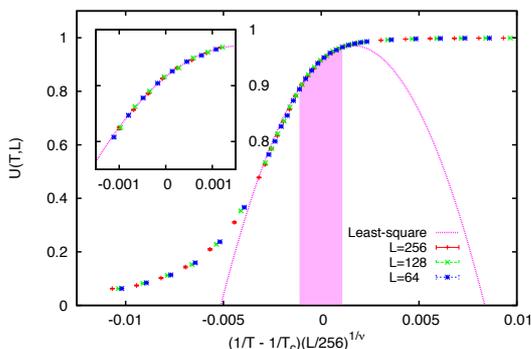


図4. 二次元イジングモデルのBinder比の新手法でのスケーリング結果。従来法では、ピンク領域内のデータだけが解析可能。

(4) 格子の回転対称性が破れた Valence Bond Solid (VBS) 秩序相が出現すると考えられている量子フラストレート系として、正方格子 J_1 - J_2 モデルがある。しかし、ネール相と VBS 相の相境界付近と考えられる領域ではテンソルネットワークを用いた計算手法では十分な精度を確保する事は難しかった。そこで先行研究の豊富な同格子上的 $SU(N)$ JQ モデルについて、 $SU(N)$ 磁性相とカラムナー-VBS 相間の量子相転移現象を負符号のない系に適用可能な量子モンテカルロ法で調べた。先行研究と同様に臨界現象特有のスケーリング則の成立を確認したが、合わせて、スケーリング指数のシステムサイズ依存性から弱い一次転移の兆候を特に大きなシステムサイズにおいて確認した。この結果は今後の磁性相と VBS 相間の量子相転移研究に多くの示唆を与える可能性が高い。

(5) 正方格子上的 J_1 - J_2 モデルでは、ネール相と VBS 相間に中間相としてトポロジカル秩序相の存在も議論されている。それに関連して、対称性によって保護されたトポロジカル秩序の存在が良く理解されている 1 次元量子系でのトポロジカル秩序相と VBS 相間の相境界付近を研究した。特に、非局所ユニタリー変換によりトポロジカル秩序を磁性秩序に変換する事で、 $SO(N)$ bilinear - biquadratic モデルを量子モンテカルロ法も適用可能なボゾンモデルに変換する事ができた。ワームアルゴリズムを用いたシミュレーションから、有限温度のエントロピーが $SO(N)$ 対称性に強く依存する事等、特に有限温度での振る舞いを明らかにした。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計7件)

- ① Kouchi Okunishi and Kenji Harada, Symmetry-protected topological order and negative-sign problem for $SO(N)$ bilinear-biquadratic chains, Physical Review B, **89** (2014) 134422. 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.89.134422
- ② Akiko Masaki, Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Syngge Todo, and Naoki Kawashima, arallelized Quantum Monte Carlo Algorithm with Non-local Worm Updates, Physical Review Letters **112** (2014) 140603. 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.140603
- ③ Kenji Harada, Tensor Network Studies of Quantum Frustrated Magnets, Proceedings of Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013). 査読有
- ④ Kenji Harada, Takafumi Suzuki, Tsuyoshi Okubo, Haruhiko Matsuo, Jie Lou, Hiroshi Watanabe, Syngge Todo, and Naoki Kawashima, Possibility of Deconfined Criticality in $SU(N)$ Heisenberg Models at

Small N, Physical Review B **88** (2013) 220408(R). 査読有

DOI: 10.1103/PhysRevB.88.220408

⑤ 原田健自, 多体問題におけるテンソルネットワーク法, 京都大学 数理解析研究所 (RIMS) 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」 RIMS 研究集会報告書 No.1848 (2012) 83-92. 査読無

URL:<http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/1848.html>

⑥ Kenji Harada, Numerical study of incommensurability of the spiral state on spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets using entanglement renormalization, Physical Review B **86** (2012) 184421. 査読有

DOI: 10.1103/PhysRevB.86.184421

⑦ Kenji Harada, Bayesian inference in the scaling analysis of critical phenomena, Physical Review E **84** (2011) 056704. 査読有

DOI: 10.1103/PhysRevE.84.056704

[学会発表] (計 11 件)

① "SU(N)ハイゼンベルクモデルで脱閉じ込め転移はあるのか?", 物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会 (第4回 CMSI 研究会), 2013年12月11日 (東京大学物性研究所).

② "Deconfined quantum criticality in SU(N) Heisenberg models: Finite size scaling analysis based on Bayesian inference", Taipei Tensor Network Workshop 2013, Dec 4, 2013 (National Taiwan University, Taipei) (Taiwan).

③ "脱閉じ込め臨界現象のユニバーサリテイ", 第3回 CMSI 研究会 ~超並列計算が拓く新しい計算物質科学~, 2012年12月3日 (自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター).

④ "Numerical study of quantum frustrated magnets using entanglement renormalization: spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets and Shastry-Sutherland model", 基研研究会「量子スピン系の物理」, 2012年11月13日 (京都大学基礎物理学研究所).

⑤ (INVITED TALK) "Numerical study of quantum frustrated magnets using entanglement renormalization", International Workshop on Cooperative Quantum Dynamics and Its Control (CQDC'12), October 30, 2012 (Jeulich super computer center, Jeulich) (Germany).

⑥ (招待講演) "多体問題におけるテンソルネットワーク法", RIMS 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 2012年10月24日 (京都大学数理解析学研究所).

⑦ "Numerical study of incommensurability

of the spiral state on spin-1/2 spatially anisotropic triangular antiferromagnets using entanglement renormalization", Conference on Computational Physics (CCP2012) for Physics, Chemistry, Biology, Engineering and related academic fields and industrial applications, October 15, 2012 (Kobe) (Japan).

⑧ (INVITED TALK) "Bayesian Inference in the Scaling Analysis of Critical Phenomena", International Workshop on Recent Developments of Studies on Phase Transitions 2012, June 19, 2012 (University of Tokyo) (Japan).

⑨ "テンソルネットワーク変分法: 空間異方的な三角格子上的反強磁性ハイゼンベルグモデル", CMSI 第1部会 & CREST 主催「強相関係に対する計算科学手法とその応用」に関する研究会, 2012年1月28日 (東京大学 (本郷キャンパス)).

⑩ "三角格子上的格子モデルのためのエンタングルメント繰り込み", 基研研究会「量子多体系のエンタングルメントとくりこみ群」, 2011年12月16日 (京都大学基礎物理学研究所).

⑪ "Magnetic Structure of Ground States in Spatially Anisotropic Triangular Antiferromagnets", the 26th Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop "Novel Quantum States in Condensed Matter 2011 (NQS2011)", November 8, 2011 (YITP, Kyoto University) (Japan).

[その他]

ホームページ等

<http://www-fcs.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~harada/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

原田 健自 (HARADA, Kenji)

京都大学・大学院情報学研究科・助教

研究者番号: 80303882