

平成 30 年 6 月 8 日現在

機関番号：15301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2013～2017

課題番号：25400402

研究課題名（和文）DMRGの代替としての量子版ノボトニー法の開発ーデコンファイン臨界性の解明ー

研究課題名（英文）Quantum Novotny method as an alternative DMRG and deconfined criticality

研究代表者

西山 由弘（Yoshihiro, Nishiyama）

岡山大学・自然科学研究科・助教

研究者番号：60294401

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,900,000円

研究成果の概要（和文）：二次元量子スピン系に対し、本研究補助により開発したノボトニーの方法により、大規模数値計算を行った。並列計算システムを整備し、そのソフトウェアシステムも開発した。結果として、二次元量子スピン系であるにもかかわらず、十分なシステムサイズが取り扱えるようになり、有限スケーリング解析もこなせるようになった。その結果、スペクトルが、臨界点の近傍で、どう振る舞うのかといった知見がえられるようになった。そうしたことから、秩序相のマグノンの束縛状態といった物理現象に普遍的な性質が現れることが分かった。

研究成果の概要（英文）：Novotony method was developed by the Grant for the analysis of the two dimensional quantum spin system with the simulation. The parallel computing and the software were developed as well. As a result, despite of the two-dimension lattice, sufficient system size became available and the finite size scaling analysis was also carried out successfully. Consequently, the detail of the spectral properties around the criticality became transparent. Actually, the magnon bound state in the ordered phase turned out to be a universal physical phenomena.

研究分野：統計力学

キーワード：臨界現象 量子スピン系 量子磁性体

1. 研究開始当初の背景

(1) 厳密対角化法は、低次元に対し有効である。残念ながら、こうじげんでは、数値対角化法は有効ではない。

(2) というのも、高次元では、取り扱えるシステムサイズが著しく制限されるからである。

(3) 数値計算手法は、2種類に大別される。すなわち、それらは、対角化法とモンテカルロ法である。量子力学のようごでは、それぞれ、清純形式と経路積分に対応する。それらは、数学的にはまったく等価だが、実際の刺入レーションにおいては、かなり、きわだった違いをもたらす。じっさいのところ、計算のアルゴリズムも、負荷のかかり具合も、得てとする物理量もまったく、対象的である。

(4) しかしながら、数値対角化により扱えるシステムサイズが制限されているので、この制限を打破し、モンテカルロ法が不得手な「フラストレーション系」や「動的系」に正攻法で挑むことがもてめられている。

(5) 同適量の計算に関して、従来は、等閑に付していたところである。というのも、モンテカルロ法で、得られる相関関数は、いわゆる、温度グリーン関数だからである。ラプラス変換を施して、動的な、実時間の相関関数を得る必要があるが、数値的には、複素面の解析性が見えないので、適当なアルゴリズムで、復元する必要がある。多くの場合、マックスエントロピー法により、その目的を達成するが、これは、あまりに、任意性が多いのである。

2. 研究の目的

(1) 本研究は、ノボトニー法の量子版の開発、応用を志向する。ノボトニーの方法によって、任意のスピン数で高次元のクラスターを構成できる。

(2) ノボトニーの方法は圧倒的な「自由さ」をもたらす。この方法により、我々は、コンピューターのパワーを節約し、有効利用することができる。これが、「d m r g の利点」である。

(3) 2次元量子系には、きわめて重要な問題が山積している。繰り返しになるが、このような問題に対し、モンテカルロの方法は、足踏み状態にある。余談であるが、級数展開法がほとんど唯一の計算法であったといえるのである。このような状況を打開する必要があり、そのスキームをここで、提案しはっせんさせるのである。

(4) モンテカルロにおいては、負符号問題の困難により、主として、フラストレーション系や電子系の研究が不得手であった。特に、スピン液体状態が見えそうなところで、負符号問題が顕在化するきらいがあった。この領域に、本研究の手法で切り込む。特に、臨界現象が、新規なものであることが期待される。というのも、1990年頃しきりに、ゲージ理論が展開されたが、結果として、これを検証するのは困難であった。後述のように、ゲ

ージ自由度を引っ掛けた臨界現象を捉えようと企図している。

3. 研究の方法

(1) そもそもノボトニー法では、長距離相互作用を系統的に(つまり、数学的にフォーマルな形式で)導入する。こうして、実効的に高次元系を構成する。(2)ともあれ、長距離相互作用のフォーマルな導入がポイントとなる。ノボトニーによると、大事な役者は、並進変換Pである。この並進変換Pにより、 $P^\dagger v O P^\dagger - v$ のユニタリー変換によりオペレーター0を「自由」に並進変換できる。

(3) 従来、2次元量子系の数値計算にはモンテカルロ法が用いられてきた。しかし、モンテカルロ法は、フラストレーションのあ番がふえてである。よって、RVB状態の研究に、きわめて、不敵である。しかしながら、ジュライ、対角化法は、2次元系で、使い勝手がわるかった、本研究の利点を活かすべく、フラストレーションを盛大に印加し、RVB層を実現し、で今ファイン転移を精査する。

4. 研究成果

(1) スピン $S=1$ の二次元量子スピン系を、数値シミュレーションした。これは、「3スピン相互作用」をもっている。よって、量子モンテカルロ法では、取り扱いが難しいことがよく知られている。本研究では、二次元でも、量子スピン液体状態が合われていることを明らかにした。注目すべきは、この相転移が、かなり顕著な臨界現象、すなわち脱閉じ込め転移をしめすといわれている点である。スピンのゲージ自由度が生き返って、CP1模型にしたがうと考えられている。

(2) イジング模型の臨界点における素励起スペクトルを、ノボトニーの方法により研究した。ともあれ、実験的にも、数理物理的にも、一次元の量子イジング模型のスペクトルは、ここ数年で、理解が進んでいる。きょうみの眼目は、(2+1)次元である。とくに、その臨界点の近傍における数理的側面の理解、ことに、ユニバーサル普遍性の探求である。秩序相におけるマグノンの束縛状態ヒエラルキのスケール関数を算出し考察した。この結果三個のそれ生きを観察した。これらは、非弾性中性子散乱によっても検証がのうである。

(3) ハイゼンベルク模型をシミュレーションした。

上手に素励起を作ると、目新しく、ユニバーサルな構造が見えると指摘されている。つまり、ゴールドストーンモードなどによりかくされていた素励起の冷えられるキーがスケール解析を施すことで、明確に浮かび上がってくる。ヒグス粒子はたいへん不安定になっており、スペクトラルピークが大変ブロードになっているようである。

(4) こういったCP1(複素一次元射影空間)模型は、素粒子論で、いわゆるゲージリオン(複素)の模型なので、素粒子論へ越境したぶんやでの発展を示唆している。

(5) マグノンの束縛状態は、素粒子理論におけるグルーオンの束縛状態であるグルーボールとの対応が見られる。つまり、極めて非摂動的な、幾何学的な解釈をすべきものであるようだ。ということで、拙速ながら、非可換ゲージ理論の有効理論の近年の発展との比較論文で提案された。

(6) ハイゼンベルクモデルにおいても、粗入試論のヒッグスとの違いがある。素粒子論では、 $U(1)$ な理論であるが、物性では、ハイゼンベルクな場合のヒッグスも作れる。このばあい、内部対象性をおおきくすることで、ヒエラルキーの構造が、かなり、かき消されることが明らかになった。

(7) XY 模型のヒッグス粒子の臨界現象を研究した。ヒッグスを励起するために、ソフトに叩かなければならない。そうしなければ、盛大に、ゴールドストーンが叩き上げられてしまう。そういったことから、ある、対象性を破壊しない摂動を提案した。いわば、動的、比熱というべきもので、きわめて、新規なものである。こいつで叩くことで、非常に微弱なスペクトル密度が得られた。たしかに、XY 相の比熱の臨界指数は、負になっているので、納得である。

(8) ちなみに、スペクトル密度の計算は、連分数法で行っている。これは、まったく、本研究手法の利点である。いじょうの計算は、ほとんど、この手法をもちいている。これにより、かなり容易に、新規な計算結果を提示することができた。

(9) スペクトル密度に対しても、臨界現象が見えて、殊に、有限サイズスケールリングが適用できることに注意したい。

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 8 件)

(1)Yoshihiro Nishiyama

“Criticality of the low-frequency conductivity for the bilayer quantum Heisenberg model”
査読あり

Eur Phys J B (2018) 91 69

(2)Yoshihiro Nishiyama

“Duality-mediated critical amplitude ratios for the (2+1)-dimensional S=1 XY model,” 査読あり

Eur. Phys. J. B 90 (2017) 173-1-6.

(3)Yoshihiro Nishiyama

“Hierarchy of the low-lying excitations for the (2+1)-dimensional q=3 Potts model in the ordered phase” 査読あり

Nucl. Phys. B 916 (2017) 28-36.

(4)Yoshihiro Nishiyama

“Magnon-bound-state hierarchy

for the two-dimensional transverse-field Ising model in the ordered phase” 査読あり
Physica A 463 (2016) 303-309

(5)Yoshihiro Nishiyama

“Universal scaled Higgs-mass gap for the bilayer Heisenberg model in the ordered phase” 査読あり
Eur. Phys. J. B 89 2016 31-5.

(6)Yoshihiro Nishiyama,

“Critical behavior of the Higgs- and Goldstone-mass gaps for the two-dimensional S=1 XY model” 査読あり

Nucl. Phys. B 897 (2015) 555-562.

(7)Yoshihiro Nishiyama,

“Deconfined criticality for the two-dimensional quantum S=1 spin model with the three spin and biquadratic interactions” 査読あり
Eur. Phys. J. B 88 (2015) 71-6.

(8)Yoshihiro Nishiyama,

“Universal critical behavior of the two-magnon-bound-state mass gap for the (2+1)-dimensional Ising Model”, 査読あり

Physica A 413 (2014) 577-582.

[学会発表](計 5 件)

(1)西山由弘

二次元量子ポッツ模型の秩序相の素励起ヒエラルキー
第 72 回年次大会 2017 大阪大学

(2)西山由弘

(2+1)次元イジング模型のマグノン束縛状態のスペクトル系列
日本物理学会 2016 年秋季大会金沢大学

(3)西山由弘

(2+1)次元 XY 模型の秩序相におけるヒッグス励起ギャップの臨界性
2015 年秋季大会関西大学

(4)西山由弘

多スピン相互作用のある空間異方的量子磁性体における脱閉じ込め臨界現象
第 70 回年次大会 2015 年 早大

(5)西山由弘

(2+1)次元イジング模型の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 2014 年秋季大会 中部大学
[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

出願年月日:

国内外の別：

取得状況（計 0 件）

名称：

発明者：

権利者：

種類：

番号：

取得年月日：

国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

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

(0)

研究者番号：

(3)連携研究者

(0)

研究者番号：

(4)研究協力者

(0)