

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 7 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400392

研究課題名(和文) テンソルネットワークを用いたフラストレート量子スピン系の非磁性相の数値的研究

研究課題名(英文) Tensor network study of non-magnetic phases in quantum spin systems

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) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：一般化SU(N)反強磁性ハイゼンベルグモデルの非磁性SU(N)シングレットダイマー相への有限温度相転移現象のユニバーサリティクラスを数値的に調べた。そして、臨界現象のスケーリング解析に有用なベイジアンスケーリング解析法をスケーリング補正項が適切に取り扱えるように改良し、3次元イジングモデルにおいてその有効性を確かめた。また、SU(N)反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態相図を明らかにし、3カラム表現の非常に弱いダイマー秩序が検証可能な最低システムサイズを見積もった。さらに、並列テンソル計算ライブラリーを標準的な並列線形計算ライブラリー上に構築しそのパフォーマンスを検証した。

研究成果の概要(英文)：We numerically study thermal phase transitions of generalized SU(N) Heisenberg models on square and honeycomb lattices. They are critical near zero temperature, and the universality classes on square and honeycomb lattices are the weak Ising one and the three-state Potts one, respectively. For the scaling analysis of critical phenomena, we propose a new Bayesian scaling analysis with corrections to scaling. We show the fast convergence of the value of inverse temperature and critical indexes by our new method for the thermal phase transition of the three-dimensional Ising model. We also numerically study the ground state phase diagram of SU(N) Heisenberg models with multi-column representations on square lattices. We estimate the minimum system size to check the existence of very weak dimer order for three-column representations. For large-scale tensor network calculation, we develop a parallel tensor network library based on the standard parallel linear-algebra library.

研究分野：物性基礎論

キーワード：テンソルネットワーク 脱閉じ込め量子臨界現象 SU(N)対称性 反強磁性ハイゼンベルグモデル valence-bond solid state

1. 研究開始当初の背景

(1) 量子磁性体の絶対零度での非磁性基底状態として、シングレット相関で特徴付けられる空間対称性を破れた valence-bond solid (VBS)状態、また、空間対称性を破らないトポロジカルな秩序として特徴付けられる量子スピン液体状態についての理解が大幅に進んできた。しかし、VBS 状態が様々な物質で観測されている一方で、量子スピン液体状態については実際の物質での存在についてもなお議論が続いており、その探求は物性研究の中心的課題の1つになっている。特に、幾何学的なフラストレーションと量子揺らぎが共に強い系であるフラストレート量子スピン系がその探求の主な舞台になっているが、量子スピン液体に関する様々な提案のどれが実現しているのかについてはよくわかっていない点が多い。この背景には、有効理論モデルの平均場を超える取り扱いの困難さがある。そのため、数値的な手法の活用が期待されるが、従来の数値的手法には様々な限界があった。このような状況の中で、最近、量子情報分野の研究の進展をベースにしたテンソルネットワークを用いた新手法の活用が注目されている。

(2) 非磁性基底状態そのものに加えて、非磁性相への量子相転移現象に関して未解明の部分が多い。例えば、VBS 相と磁性相の間の脱閉じ込め量子臨界現象は、対称性の自発的破れでは記述されない新しいタイプの量子臨界現象であり、高い関心をもたれている。特に、脱閉じ込め量子臨界点近傍では非常に弱い VBS 秩序が想定されるため、その存在により従来の量子スピン液体状態に関する議論にも強い影響を与える可能性がある。

2. 研究の目的

(1) 量子揺らぎの強い量子スピン系を例として、テンソルネットワークを用いた新手法の総合的有効性の向上を進める。特に、実装面においても、非自明な並列化の研究を進める。

(2) 量子スピン系の非磁性相におけるトポロジカル秩序、及び、磁性相と非磁性相間の脱閉じ込め量子臨界現象の数値的検証を進め、これらの同定を行う。特に、トポロジカル秩序の有無や脱閉じ込め量子臨界現象の可能性について明らかにする。

3. 研究の方法

(1) テンソルネットワーク計算の為に並列化ライブラリーを開発し、そのパフォーマンスの検証を行う。

(2) 量子スピン系（特に一般化された反強磁性ハイゼンベルグモデル）を対象として、脱閉じ込め量子臨界現象と関連のある現象の数値的研究を進める。

4. 研究成果

(1) 絶対零度で脱閉じ込め量子臨界現象を起こしていると考えられている一般化 SU(N)反強磁性ハイゼンベルグモデルの有限温度相転移を数値的に調べた。このモデルは反強磁性ハイゼンベルグ相互作用を一般化した SU(N)シングレット対への射影演算子で表される相互作用によって構成されている。射影演算子の多体項によって生まれる非磁性 SU(N)シングレットダイマー相と SU(N)磁性相の間の脱閉じ込め量子臨界現象が起きると期待されている。SU(N)シングレットダイマー相では、正方格子で格子の4回回転対称性、蜂の巣格子で3回回転対称性が自発的に破れる。ダイマー秩序がベクトル場で表現されるとすると、それぞれの回転対称性破れを起こす異方性の有意性はダイマー秩序相への有限温度転移に強い影響を与えると予想される。

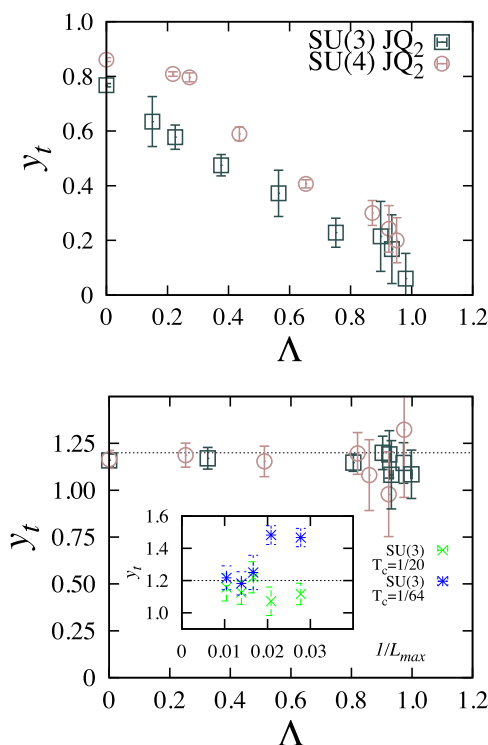


図1. 正方格子（上図）と蜂の巣格子（下図）上の一般化 SU(N)反強磁性ハイゼンベルグモデルにおける SU(N)シングレットダイマー相 ($\Lambda \leq 1$)への有限温度相転移の臨界指数。

量子モンテカルロ法により、SU(N)シングレットダイマー相への有限温度相転移現象を数値的に調べた結果、正方格子、蜂の巣格子、共に絶対零度付近まで臨界的であることがわかった。さらに、それぞれの臨界現象が正方格子では弱い2次元イジングユニバーサリティクラスに、蜂の巣格子では3状態ポッツユニバーサリティクラスに属している事がわかった(図1参照)。これらの結果は、4(3)回転対称性を破るダイマー場の異方性がマージナル(有意)である事に強く影響されていることを示す。なお、絶対零度付近まで臨界的で

あることはこれらのモデルにおける絶対零度での脱閉じ込め量子臨界現象の存在と矛盾はしない事も確かめられた。

(2) 臨界現象のユニバーサリティクラスの研究ではスケーリング解析がよく用いられる。ただ、関数形が未知のスケーリング関数を含むスケーリング則をデータに当てはめるスケーリング解析には様々な困難がある。それを大幅に改良したベイジアンスケーリング解析法の改良を行った。

脱閉じ込め量子臨界現象など興味深い臨界現象ではしばしばスケーリング則に対する補正項が現れる。しかし、スケーリング補正項の存在はベイジアンスケーリング解析に不適切性をもたらすことがわかった。そこで、スケーリング補正項を多項式展開する事により、系統的にスケーリング補正項を取り入れたベイジアンスケーリング解析法を定式化した。

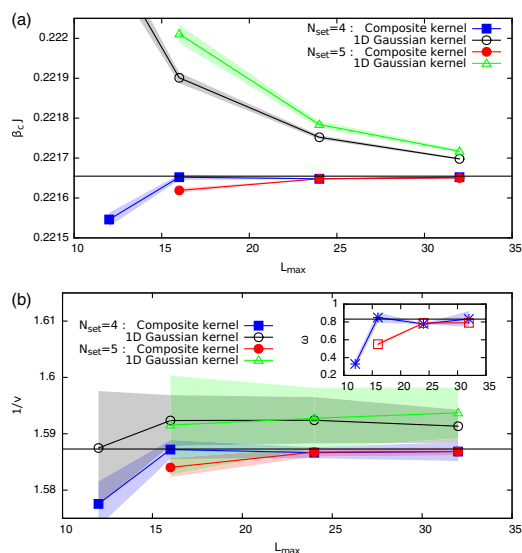


図2. 3次元イジングモデルの臨界現象データのスケール解析結果。(a) 臨界逆温度のシステムサイズ依存性。(b) 臨界指数のシステムサイズ依存性。

新手法(合成カーネル法)と従来手法(ガウシアンカーネル法)のパフォーマンスを比較したものが図2である。スケール補正項を含めた新手法は従来法と違い他の解析で求められている臨界逆温度や臨界指数値に小さなシステムサイズのデータから良い収束性を示していることがわかった。

(3) $SU(N)$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態相図に関する研究を行った。このモデルを解析したReadらの仕事は脱閉じ込め量子臨界現象に関する理論の基礎になっているため、特にマルチカラム表現を持つ $SU(N)$ モデルに関して基底状態相図を量子モンテカルロシミュレーションにより解析した。その結果、正方格子では2カラム表現では、 $N=10$ において磁性状態からネマティックダイマー状

態に基底状態が直接的に変わることが確認された。これはReadらの予想と一致する。一方で、3カラム表現では、 $N=15$ での磁性的秩序の消失は確認されたが予想されるカラムダイマー秩序は確認できなかった(図3参照)。しかしながら、Readらの解析と量子モンテカルロシミュレーションを組み合わせることで、ダイマー秩序が非常に弱く、シミュレーションを行った最大システムサイズ($L=128$)を4倍以上にして初めて検知可能であることがわかった。したがって、我々の結果はReadらの仕事をサポートする数値的証拠として考えることができる。

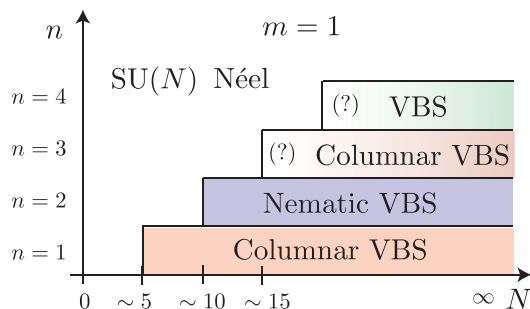


図3. 正方格子上の $SU(N)$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態相図。

(4) PBLAS や ScaLAPACK を利用した並列テンソル計算ライブラリーを構築した。大きな特徴はPBLAS や ScaLAPACK など標準的な並列線形計算ライブラリーをベースにしているため、一般的な並列計算機環境で稼働する事である。また、ライブラリーはC++言語で実装されているが、関数インターフェイスはPython言語の標準的な数値計算ライブラリーNumpy風になっており、Python言語コードからの移植性も高い。我々の計算ライブラリーでは、例えば、代表的なテンソルネットワークアルゴリズムである高次特異値分解に基づくテンソル繰り込み群法では、テンソルのボンド次元が128では、プロセッサ数が数百近くまでストロングスケールを示す。また、プロセッサ数を固定しても大きなボンド次元に対する計算時間のスケールは変わらないなど、並列テンソル計算ライブラリーとして実用的なものになっている。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計3件)

- ① Tsuyoshi Okubo, Kenji Harada, Jie Lou, and Naoki Kawashima, $SU(N)$ Heisenberg model with multicolumn representations, *Physical Review B*, **92** (2015) 134404. 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevB.92.134404
- ② Kenji Harada, Kernel method for corrections to scaling, *Physical Review E*, **92** (2015) 012106. 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevE.92.012106

- ③ Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Haruhiko Matsuo, Synge Todo, and Naoki Kawashima, Thermal phase transition of generalized Heisenberg models for SU(N) spins on square and honeycomb lattices, Physical Review B, **91** (2015) 094414. 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevB.91.094414

[学会発表] (計 11 件)

- ① (シンポジウム講演) “繰り込み群とテンソルネットワーク”, 日本物理学会第72回年次大会 領域11、領域3、素粒子論領域合同シンポジウム「テンソルネットワーク法とその可能性」, 2017年3月18日 (大阪大学, 豊中市).
- ② (INVITED TALK) “General Entanglement Branching in a Tensor Network”, Fourth Workshop on Tensor Network States: Algorithms and Applications, Dec. 14, 2016 (National Center for Theoretical Sciences, Hsinchu, Taiwan).
- ③ (INVITED TALK) “Branching and tensor network”, International Workshop on Tensor Networks and Quantum Many-Body Problems (TNQMP2016), June 27, 2016 (ISSP, Kashiwa, Chiba).
- ④ “経路積分量子モンテカルロ法の負符号問題と1次元量子系のトポロジカル秩序の関係”, Quantum Computation and Machine Learning Seminar Series, 2016年3月16日 (早稲田大学).
- ⑤ (シンポジウム講演) “シミュレーションで探る量子の世界: 絶対零度での秩序と臨界現象”, スパコン「京」がひらく社会と科学 シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」, 2016年1月29日 (よみうり大手町ホール).
- ⑥ (チュートリアル講演) “量子フラストレート磁性体のテンソルネットワークを用いた数値的研究”, 第32回量子情報技術研究会 (QIT32), 2015年5月26日 (大阪大学Σホール).
- ⑦ (シンポジウム講演) “二次元 SU(N) ハイゼンベルグモデルにおける脱閉じ込め量子臨界現象”, 日本物理学会 第70回年次大会 シンポジウム「『京』が拓いた物性物理」, 2015年3月22日 (早稲田大学).
- ⑧ “Quantum Monte Carlo study of Quantum Criticality on SO(N) Bilinear-biquadratic Chains”, International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems, Feb. 18, 2015 (Hongo Campus, The University of Tokyo) (Japan).

- ⑨ (INVITED TALK) “Quantum Monte Carlo study of Quantum Criticality on SO(N) Bilinear Biquadratic Chains”, the 9th International Conference on Computational Physics (ICCP9), Jan. 07, 2015 (National University of Singapore) (Singapore).
- ⑩ (INVITED TALK) “MERA tensor network and its application on quantum frustrated magnets”, 10sor network workshop --- Field 2x5 joint workshop on new algorithms for quantum manybody problems ---, Nov. 25, 2014, (Kashiwa Future Center, Kashiwa, Chiba) (Japan).
- ⑪ “Possibility of Deconfined Criticality in SU(N) Heisenberg Models at Small N”, the YITP long-term Workshop “Novel Quantum States in Condensed Matter 2014” (NQS2014), Nov. 17, 2014 (YITP, Kyoto university, Kyoto) (Japan).

[その他]

インタビュー記事

「物質の中に宇宙が見えてくる (スケールを超える臨界現象を探す)」(理化学研究所 計算科学研究機構 広報誌「計算科学の世界」)

ホームページ

<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

(2) 研究協力者

森田 悟史 (MORITA Satoshi)
東京大学・物性研究所・助教