

令和 3 年 6 月 3 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05564

研究課題名（和文）強相関量子スピン系におけるトポロジカル秩序とエンタングルメントに関する研究

研究課題名（英文）Study of topological order and entanglement in strongly correlated quantum spin systems

研究代表者

藤堂 眞治（Todo, Synge）

東京大学・大学院理学系研究科（理学部）・教授

研究者番号：10291337

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：量子スピン系における様々な量子状態とそれら量子相の間で引き起こされる新奇な量子相転移現象の特性を解明するために、量子モンテカルロ法やテンソルネットワーク法に基づくさまざまな新規手法の開発を行った。トポロジカルな秩序を特徴付ける量は、これまで主として一次元量子系を中心に研究が進められてきたが、高次元系に対しても精密かつ効率的な測定が可能となった。開発した手法を活用して大規模なシミュレーションを行い、トポロジカル相の相田の相転移などの解析を行った。また、新しいアルゴリズムに基づくソフトウェアの整備・公開もすすめた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

トポロジカルな秩序やトポロジカルな励起は、エキゾチックな相転移現象や非自明な量子状態において非常に大きな役割を果たしており、その理解は学術的にも新しい量子技術の発展のためにも重要である。本研究で開発された、量子モンテカルロ法やテンソルネットワーク法に基づくさまざまな新規手法は、この分野の今後の研究に大きな波及効果が期待される。

研究成果の概要（英文）：In order to characterize the various quantum states in quantum spin systems and the novel quantum phase transitions between these quantum phases, we have developed various numerical methods based on quantum Monte Carlo and tensor network methods. Although the quantities characterizing the topological order have been studied mainly for one-dimensional quantum systems, precise and efficient measurements are now possible for higher-dimensional systems. Using the developed method, we carried out large-scale simulations to analyze the phase transition of the topological phase field. We have also developed and released software based on the new algorithm.

研究分野：計算物理・物性理論

キーワード：トポロジカル秩序 エンタングルメントエントロピー 臨界現象 計算物理 テンソルネットワーク  
量子モンテカルロ法 量子スピン系 量子ダイマー模型

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

トポロジカルな秩序やトポロジカルな励起は、エキゾチックな相転移現象や非自明な量子状態において非常に大きな役割を果たしている。擬一次元・二次元などの低次元系、フラストレートしたスピン系などにおける、スピンギャップ状態とよばれるトポロジカル相やそれらの相の間の量子相転移、Kosterlitz-Thouless (KT)型転移に代表される渦の凝集・乖離を伴う臨界現象などが代表的な例である。特に、強い量子ゆらぎに支配された量子トポロジカル状態では、古典的な秩序が壊れ、代わりにダイマー(スピン二重項を組むスピンの組)が空間的に敷詰められた構造(VBS状態)といった、新たな秩序が実現する。これまでの局所的な秩序変数ではトポロジカルな状態の特徴を捉えることはできない。これまで一次元のトポロジカル状態に対しては、「ストリング秩序変数」、「ブラケット秩序変数」、「ひねり秩序変数」など様々なトポロジカル秩序変数が提案され、それらを用いることでトポロジカルな秩序を持つ状態か否かを定量的に判断することができるようになってきた。さらに、「対称性に保護されたトポロジカル(SPT)状態」と呼ばれる概念が提案され、一次元のトポロジカル状態はこのSPT状態に分類されることなどが明らかとなってきた。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、量子スピン系における様々な量子状態とそれら量子相の間で引き起こされる新奇な量子相転移現象の特性を明らかにすることにある。トポロジカルな秩序を特徴付ける量は、これまで主として一次元量子系を中心に研究が進められてきたが、これらを高次元に応用し、量子モンテカルロ法やテンソルネットワーク法などを用いたより精密かつ効率的な測定方法を開発する。さらにそれらを用いて大規模なシミュレーションを行い、高次元におけるトポロジカル状態の本質の解明を目指す。また、新しいアルゴリズムに基づくソフトウェアの整備・公開もまた本研究の大きな目的の一つである。

### 3. 研究の方法

我々はこれまで量子モンテカルロ法あるいは古典モンテカルロ法を中心に、様々な手法の開発に取り組んできた。主な成果としては、長距離相互作用系に対するオーダーN法、詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法、基底状態に対するクラスターアルゴリズム、ループアルゴリズムの大規模並列化などが挙げられる。また、近年急速に開発が進んできたテンソルネットワーク法の二次元やダイナミクスへの応用に関する研究にも取り組んできている。これまでのアルゴリズム開発の成果・知見を生かして、我々の開発してきた方法論をさらに発展させることにより、試行的な波動関数ではなく、二次元強相関量子スピン系のハミルトニアン基底状態としてあらわれる量子状態の特性を定量的に解析するという点が本研究の最大の特色であり、それにより二次元のトポロジカル秩序の本質を明らかにする。

### 4. 研究成果

#### (1) 量子ダイマー模型の有限温度相図

量子ダイマー模型は、フラストレートした磁性体の低エネルギー有効模型として提案された。我々は、一般の格子上の量子ダイマー模型に対する非局所更新量子モンテカルロ法を開発した。量子ダイマー模型のハミルトニアンには負符号問題はないが、ダイマーの配置に強い幾何学的な制限があるためモンテカルロシミュレーションは非常に困難であった。量子ダイマー模型に対する効率的なクラスター更新法を、ダイマーとモノマー、および多体相互作用を含む、より一般的なクラスの模型に拡張した。さらに、交換モンテカルロ法を組み合わせることで、巻き付き数を固定しないシミュレーションを実現した。この新しいアルゴリズムを用いてシミュレーションを行い、有限サイズスケールリングを組み合わせることで、有限温度相図を精密に決定した。また、テンソルネットワーク法を異方的な二次元古典ダイマー模型に適用し、等方極限でのブラケット相の有無を議論した。

#### (2) 二次元系におけるトポロジカル秩序

SPT相を特徴づけると期待されている strange correlator を量子モンテカルロ法により用いて精度良く計算する手法を開発し、一次元系においてテスト計算を行い、その有効性を示した。

#### (3) テンソルネットワーク法の発展

テンソルくりこみ群法では大規模な古典系/量子系の物理量を効率的に計算することができる。しかしながら、TRGやHOTRGといった既存の手法では、高次元になるほど計算量が膨大になってしまうという問題点があった。この問題を解決するために、既存手法に比べて圧倒的に計算量の

少ない ATRG 法やボンド重みを取り入れたテンソルくりこみ群法を開発した。後者では、テンソルネットワークを頂点上だけでなく頂点を結ぶ線にもテンソルを置いた形に拡張することで、実空間くりこみ法の精度を、既存の同程度の計算時間を要する数値計算手法に比べて 100 倍程度高めることに成功した。この手法は一般のテンソルネットワークに対して適用可能である。さらに、テンソルネットワーク法の一つである HOTRG 法を非一様系に拡張し、ボンド希釈系を含む二次元イジングモデルに適用した。また、繰り込みの際に用いる isometry を、すでに計算したものを再利用することで、計算コストを減らし、かつ通常の HOTRG とほとんど変わらない精度で計算できることを示した。

#### (4) 高次元系におけるエンタングルメントエントロピー

エンタングルメントエントロピーは、量子多体系における量子相関を表す指標のひとつである。我々は基底状態量子モンテカルロ法とレプリカ法を組み合わせ、基底状態のエンタングルメントエントロピーを直接計算する量子モンテカルロ法を開発した。また、虚時間方向の境界条件のサンプリングの効率を高めるため Wang-Landau 法を導入し、さらに高並列計算のためのライブラリ開発を行った。

#### (5) 経路積分モンテカルロ法

ボース粒子系に対する経路積分モンテカルロ法において、粒子の対称性を正しく取り入れる新しい更新方法を提案した。Event-chain モンテカルロの手法と、worm algorithm の手法を援用し、詳細釣り合い条件を破るアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムを Bose 粒子系に適用し、従来の方法より分布の収束が速く Trotter 数に対する時間計算量が改善した結果を得た。さらに、ハミルトニアンモンテカルロ法において詳細つりあいを破る方法についても研究を進めた。

#### (6) 長距離相互作用系における有効次元

長距離相互作用のあるスピンモデルの臨界減衰指数に関してモンテカルロ法による解析を行った。スケール補正項を打ち消すユニバーサルな方法を開発し、境界領域における相転移の臨界指数の振る舞いを明らかにした。また、空間的な相関を持つランダム磁場イジング模型の臨界現象を調べ、有効次元がランダム磁場の相関指数に比例して変化する様子が示唆された。さらに、相関が強くなるほど系の有効次元が下部臨界次元に近づき、物理量の有限サイズ効果が顕在化だけでなく、比熱に新たなピーク構造が現れるなど、これまで予想されていなかった特異な振る舞いを明らかにした。

#### (7) 計算物質科学アプリケーション開発・公開

計算物質科学アプリ・ツールをおさめた統合パッケージ MateriApps LIVE! について、新しいアプリ・ツールの追加、OS のバージョンアップなど整備を進めた。特に、強相関多体系のためのシミュレーションソフトウェア (Tenex、ALPS Core、DDMRG、DCore、mVMC など) を新たに収録した。また、インストールスクリプト集 MateriApps Installer も大幅なバージョンアップを行い、東大物性研のスパコンシステムへの対応などを行った。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Adachi Daiki, Okubo Tsuyoshi, Todo Synge	4. 巻 102
2. 論文標題 Anisotropic tensor renormalization group	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 054432 ~ 054432
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.054432	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hoshi Takeo, Kawamura Mitsuaki, Yoshimi Kazuyoshi, Motoyama Yuichi, Misawa Takahiro, Yamaji Youhei, Todo Synge, Kawashima Naoki, Sogabe Tomohiro	4. 巻 258
2. 論文標題 K ? Open-source library for the shifted Krylov subspace method of the form $(zI-H)x=b$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107536 ~ 107536
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2020.107536	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shirai Tatsuhiko, Todo Synge, Miyashita Seiji	4. 巻 101
2. 論文標題 Dynamical phase transition in Floquet optical bistable systems: An approach from finite-size quantum systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 013809 ~ 013809
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.101.013809	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Todo Synge, Matsuo Haruhiko, Shitara Hideyuki	4. 巻 239
2. 論文標題 Parallel loop cluster quantum Monte Carlo simulation of quantum magnets based on global union-find graph algorithm	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 84 ~ 93
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2019.01.004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Hiroshi、Morita Satoshi、Todo Synge、Kawashima Naoki	4. 巻 88
2. 論文標題 Fast Algorithm for Generating Random Bit Strings and Multispin Coding for Directed Percolation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 024004 ~ 024004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.024004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Adachi Daiki、Tsujiyama Naoto、Akashi Ryosuke、Todo Synge、Tsuneyuki Shinji	4. 巻 241
2. 論文標題 Search for common minima in joint optimization of multiple cost functions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 92 ~ 97
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2019.02.004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Motoyama Yuichi、Todo Synge	4. 巻 98
2. 論文標題 ZN Berry phase and symmetry-protected topological phases of the SU(N) antiferromagnetic Heisenberg chain	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195127 ~ 195127
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.195127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishikawa Fumihito、Todo Synge	4. 巻 98
2. 論文標題 Localized mode and nonergodicity of a harmonic oscillator chain	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 062140 ~ 062140
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.98.062140	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Horita Toshiki, Suwa Hidemaro, Todo Synge	4. 巻 95
2. 論文標題 Upper and lower critical decay exponents of Ising ferromagnets with long-range interaction	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 1~11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.95.012143	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Gaenko A., Antipov A.E., Carcassi G., Chen T., Chen X., Dong Q., Gamper L., Gukelberger J., Igarashi R., Iskakov S., K?nz M., LeBlanc J.P.F., Levy R., Ma P.N., Paki J.E., Shinaoka H., Todo S., Troyer M., Gull E.	4. 巻 213
2. 論文標題 Updated core libraries of the ALPS project	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 235~251
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2016.12.009	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kawamura Mitsuaki, Yoshimi Kazuyoshi, Misawa Takahiro, Yamaji Youhei, Todo Synge, Kawashima Naoki	4. 巻 217
2. 論文標題 Quantum lattice model solver H	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 180~192
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2017.04.006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 山地洋平, 三澤貴宏, 吉見一慶, 河村光晶, 藤堂眞治, 川島直輝	4. 巻 52
2. 論文標題 量子格子模型の汎用数値対角化パッケージH -スピン液体近傍の熱・スピン励起への適用-	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 539~550
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 本山裕一, 三澤貴宏, 加藤岳生, 藤堂眞治	4. 巻 52
2. 論文標題 物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 743 ~ 755
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計12件 (うち招待講演 8件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Daiki Adachi, Tsuyoshi Okubo, Synge Todo
2. 発表標題 Anisotropic Tensor Renormalization Group
3. 学会等名 Frontiers of Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Chihiro Kondo, Synge Todo
2. 発表標題 Measurement of entanglement entropy by ground-state Monte Carlo
3. 学会等名 4th International Symposium on Research and Education of Computational Science (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Optical bistability in a quantum low photon-density regime
3. 学会等名 International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Markov-chain Monte Carlo without detailed balance
3. 学会等名 X Brazilian Meeting on Simulational Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Optical bistability in a quantum low photon-density regime
3. 学会等名 Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Optical bistability in a low-photon-density regime
3. 学会等名 2019 Workshop of Max Planck-UBC-UTokyo Centre for Quantum Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Algorithms and Libraries in Computational Condensed Matter Physics
3. 学会等名 The 2nd Innovation Camp for Computational Materials Science (招待講演)
4. 発表年 2018年



1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 藤堂眞治, 「空間相関をもつランダム場イジング模型の臨界現象と有効次元の解析
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山本卓矢、藤堂眞治
2. 発表標題 非一様系な古典イジング模型に対する射影演算子を用いたテンソルネットワーク繰り込み
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 古典コンピュータによる量子シミュレーション
3. 学会等名 第14回原子・分子・光科学検討会(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Recent progress in Markov Chain Monte Carlo Method
3. 学会等名 36th JSST Annual International Conference on Simulation Technology(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 物質科学シミュレーション～はじめの一步
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会平成29年度秋季大会（招待講演）
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

藤堂研究室 <a href="https://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/">https://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/</a> MateriApps <a href="https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/">https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/</a> MateriApps LIVE! <a href="https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/">https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/</a> MateriApps Installer <a href="https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/mainstaller/">https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/mainstaller/</a>
---

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------