

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400384

研究課題名(和文)低次元量子スピン系における量子相関とトポロジカルな秩序に関する研究

研究課題名(英文) Study of quantum correlation and topological order in low-dimensional quantum spin systems

研究代表者

藤堂 眞治 (Todo, Syngé)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授

研究者番号：10291337

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：低次元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を特徴付ける「トポロジカル秩序変数」を高次元に拡張し、量子モンテカルロ法などを用いた精密かつ効率的な測定方法を開発した。また、モンテカルロ法と機械学習の手法を組み合わせることにより動的臨界現象の解析が可能となった。大規模な量子モンテカルロシミュレーションを行い、量子相転移や量子相の解析を行った。

研究成果の概要(英文)：We have extended "topological order parameter," which characterizes various quantum states and novel quantum phase transitions in low-dimensional quantum spin systems, to high dimensions, and developed methods for measuring these order parameters with high accuracy. We have also combined the Monte Carlo method with machine learning technique, which enables precise analysis of dynamical critical phenomena. We have performed large-scale quantum Monte Carlo simulations and analyzed various quantum phase transitions and quantum states.

研究分野：計算物理、統計物理、物性基礎論

キーワード：計算物理 量子モンテカルロ トポロジカル秩序 量子スピン系 量子相転移 動的臨界現象 長距離相互作用

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

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、絶対零度における量子スピン系などにおける、非自明なスピン状態や新奇な臨界現象をともなう相転移が注目を集めている。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-重項を組むスピンの組)が空間的に敷つめられた構造(VBS 状態)といった、これまでの秩序変数では捉えることのできない新たな秩序が実現する。近年、SU(N)対称性をもつスピンモデルの基底状態や2次元スピンパイエルス系における非磁性状態、量子ホール系におけるエッジ状態など、古典的な秩序変数で記述することのできない新奇な量子状態に対して、様々な新しい物理量、新しい秩序変数が提案されている。VBS 状態におけるダイマーの空間配位(隠れた秩序)を検出する秩序変数の代表的な例としては、 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルグ鎖に対する「ストリング秩序変数」が挙げられる。もう一つの非局所的な秩序変数として「ひねり秩序変数」が挙げられる。しかしながら、これらの非局所的な秩序変数は、鎖や梯子などの1次元系でしか有効でない。一方で、秩序変数では捕らえにくい量子相関の強さを、間接的に測定する方法も近年注目されている。その中で最も研究が進んでいるものに、「エンタングルメントエントロピー」がある。この量は、系を2つの部分系に分けた時、それら部分系間の量子相関の強さを特徴付ける量である。関連する類似の量である「相互情報量」についても研究が進んでいる。

2. 研究の目的

本研究の目的は低次元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。トポロジカル秩序変数、エンタングルメントエントロピー、局所 Z_2 ベリー位相とい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1次元量子系を中心に研究が進められてきたが、これらを高次元に拡張し、量子モンテカルロ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量子モンテカルロシミュレーションを行い、新奇な相転移や量子相の解明を目指す。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

本研究「低次元量子スピン系における量子相関とトポロジカルな秩序に関する研究」は、以下の5つのテーマからなる。

1. 量子系特有の状態を特徴付ける秩序変数の一般化、高次元化
2. トポロジカル量の測定アルゴリズムの開発
3. 二次元基底状態相転移への応用
4. ランダムスピン系、長距離相互作用系への応用研究
5. アプリケーションの整備と公開

平成26年度は、テーマ1,2を中心について重点的に研究を進めた。平成27年度以降は、テーマ1,2を引き続き進めると同時に、その成果を元にテーマ3以降の研究を行った。

4. 研究成果

主な研究成果を以下に述べる。

量子効果の強い低次元量子スピン系の基底状態は、古典系では対応するものない「トポロジカル秩序変数」で特徴付けられる。我々はトポロジカル秩序変数の一つである局所 Z_2 ベリー位相を、SU(N)対称性をもつ一次元スピン系への拡張を行った。量子モンテカルロ法による局所ベリー位相の測定方法を開発し、N個のトポロジカルに異なる相が存在することを示した。

格子の自由度と結合した量子反強磁性体では、スピンパイエルス不安定性が生じ、自発的にスピンギャップの開いた相が現れる。格子振動、すなわちフォノンの量子性(離散性)を考慮にいれると、フォノン・スピン結合が有限の強さにおいて、量子相転移が生じる。我々は、量子モンテカルロ法によりエネルギーギャップを精密に測定する「高次モーメント法」を開発し、さらにレベルスペクトルスコピー法を組み合わせることにより、その量子相転移の性質を明らかにした。

ワームアルゴリズム量子モンテカルロ法と機械学習を組み合わせることにより、空間的・時間的な非等方性の強い量子系における、量子相転移の解析・動的臨界指数の見積もりを高精度で行う方法を開発し、その応用を行った。磁場中の二次元XYモデルの量子相転移に適用し、時間反転対称性の有無により動的臨界指数が1あるいは2の値をとることを示した。また、量子モンテカルロ法と機械学習を組み合わせ動的臨界指数を計算する手法をランダムスピン系に拡張し、一次元ランダムシングレット相とランダムダイマー相における動的臨界現象の違いを明らかにした。ランダム化学ポテンシャル中の二次元ボーズ・ハバードモデルの示す、超流動--ボーズ・ガラス転移の解析も行った。

量子モンテカルロ法では、負符号問題のため、解析が非常に難しくなるフラストレート量子スピン系に対する、系統的なシミュレーション手法として、テンソルネットワーク法のプログラムを開発し、その収束性を議論した。

長距離相互作用を持つスピン系は、近接相互作用のみの系とは異なった臨界現象を示すことが知られている。しかしながら、平均場的領域、中間領域、近接的領域、それぞれの境界については、これまで明らかではなかった。我々は、べき的に減衰する長距離相互作用を持つ二次元正方格子イジングモデルを、オーダーN クラスタアルゴリズムを用いてシミュレーションを行い、臨界指数と臨界係数を精度よく評価した。また、「combined Binder ratio」と呼ばれる、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。

S=1 反強磁性ハイゼンベルグ鎖におけるハルデン状態は、対称性に保護されたトポロジカル(SPT)状態の代表例として知られている。しかしながら、二次元以上においてSPT相が存在するかどうか、さらにそれを特徴づけるトポロジカル秩序変数は何か、など未解明の問題も多い。我々は、近年提案された「Strange Correlator」と呼ばれる相関関数を量子モンテカルロ法を用いて精度良く計算する手法を開発した。また、一次元系において、Strange CorrelatorがSPT相を正しく特徴づけることを確認した。さらに、ワームアルゴリズム量子モンテカルロ法をSU(N)対称性を持つmultibox反強磁性体に拡張し、二次元のSPT相に対する予備的な計算を進めた。

本研究の一貫として開発した、ワームアルゴリズム量子モンテカルロ法のプログラム(worms)、次世代版ALPSコアライブラリALPSCore、さらには、新しい量子統計力学の計算手法を取り入れた並列厳密対角化パッケージH、シフト型クリロフ部分空間法に基づく線形演算ライブラリKなど多くのソフトウェアをオープンソースとして公開した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計10件)

(1) Mitsuaki Kawamura, Kazuyoshi Yoshimi, Takahiro Misawa, Youhei Yamaji, Syngé Todo, Naoki Kawashima, Quantum Lattice Model Solver HΦ, Comp. Phys. Comm 217, 180-192 (2017) 査読有.
DOI: 10.1016/j.cpc.2017.04.006

(2) Andrey E. Antipov, Gabriele Carcassi, Tianran Chen, Xi Chen, Qiaoyuan Dong, Lukas Gamper, Jan Gukelberger, Ryo Igarashi, Sergey Iskakov, Mario Könz, James P. F. LeBlanc, Ryan Levy, Ping Nang Ma, Joseph E Paki, Hiroshi Shinaoka, Syngé Todo, Matthias Troyer, Emanuel Gull, Updated Core Libraries of the ALPS Project, Comp. Phys. Comm 213, 235-251 (2017) 査読有.
DOI: 10.1016/j.cpc.2016.12.009

(3) Toshiki Horita, Hidemaro Suwa, Syngé Todo, Upper and lower critical decay exponents of Ising ferromagnet with long-range interaction, Phys. Rev. E 95, 012143 (2017) 査読有.
DOI: 10.1103/PhysRevE.95.012143

(4) 渡辺宙志, 藤堂眞治, 「特集『京』が拓いた物性物理」について, 分子シミュレーション研究会会誌 アンサンブル 18, 5-6 (2016) 査読無.
DOI: 10.11436/mssj.18.5

(5) 藤堂眞治, 「"実験技術"としての量子多体系シミュレーションソフトウェアALPS」, 日本物理学会誌 70, 275-282 (2015) 査読有.
<http://www.jps.or.jp/books/gakkaishi/2015/04/704.html>

(6) Shinya Yasuda, Hidemaro Suwa, Syngé Todo, Stochastic approximation of dynamical exponent at quantum critical point, Phys. Rev. B 92, 104411 (2015) 査読有.
DOI: 10.1103/PhysRevB.92.104411

(7) Hidemaro Suwa, Syngé Todo, Generalized Moment Method for Gap Estimation and Quantum Monte Carlo Level Spectroscopy, Phys. Rev. Lett. 115, 080601 (2015) 査読有.
DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.080601

(8) Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Haruhiko Matsuo, Syngé Todo, Naoki Kawashima, Thermal Phase Transition of Generalized Heisenberg Models for SU(N) Spins on Square and Honeycomb Lattices, Phys. Rev. B 91, 094414 (2015) 査読有.
DOI: 10.1103/PhysRevB.91.094414

(9) Yusuke Konishi, Ryo Igarashi, Shunsuke Kasamatsu, Takeo Kato, Naoki Kawashima, Tsutomu Kawatsu, Hikaru Kouta, Masashi Noda, Shoichi Sasaki, Yayoi Terada, Syngé Todo, Shigehiro Tsuchida, Kazuyoshi Yoshimi, Kanako Yoshizawa, MateriApps --- a Portal Site of Materials Science Simulation, JPS Conf. Proc. 5, 011007 (2015) 査読有.
DOI: 10.7566/JPSCP.5.011007

(10) Akiko Masaki, Takafumi Suzuki, Kenji Harada, Synge Todo, Naoki Kawashima, Parallelized Quantum Monte Carlo Algorithm with Nonlocal Worm Updates, Phys. Rev. Lett. 112, 140603 (2014) 査読有.
DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.140603

〔学会発表〕(計 14 件)

(1) Synge Todo, Dynamical property of strongly anisotropic quantum criticality in random spin systems, Workshop on quantum dynamics and response, 2017年3月13日, 東大(文京区, 東京).

(2) 藤堂眞治, 加藤岳生, MateriApps による物質科学シミュレーション ~ MateriApps LIVE! と格子模型計算, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 15 日, 金沢大(金沢, 石川).

(3) 藤堂眞治, 加藤岳生, Material Science Simulation by MateriApps LIVE!, TIA ポスター交流会, 2016 年 8 月 30 日, エポカル筑波(つくば, 茨城).

(4) Synge Todo, Critical Decay Exponent of Ising Ferromagnet with Long-range Interaction, 2nd Conference on Condensed Matter Physics, 2016 年 7 月 20 日, Nanjing (China) (招待講演)

(5) 藤堂眞治, 確率的最適化によるランダムスピン系の量子臨界現象の研究, 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」, 2016 年 4 月 5 日, 物性研(柏, 千葉) (招待講演).

(6) Hidemaro Suwa, Shinya Yasuda, Synge Todo, Stochastic Approximation of Dynamical Exponent at Quantum Critical Point, APS March Meeting 2016, 2016 年 3 月 16 日, Baltimore (USA).

(7) Synge Todo, MateriApps: a Portal to Materials Science Simulation, Supercomputing Frontiers Singapore 2016, 2016 年 3 月 15 日, Singapore (Singapore).

(8) Synge Todo, Quantum criticality with strong space-time anisotropy, LMU-UT Workshop, 2016 年 2 月 29 日, 東大(文京区, 東京).

(9) Synge Todo, Ryo Igarashi, Shusuke Kasamatsu, Takeo Kato, Naoki Kawashima, Tsutomu Kawatsu, Yusuke Konishi, Hikaru Kouta, Haruhiko Matsuo, Masashi Noda,

Shoichi Sasaki, Yayoi Terada, Shigehiro Tsuchida, Kazuyoshi Yoshimi, Kanako Yoshizawa, MateriApps: a Portal for Materials Science Simulation, SC15, 2015 年 11 月 18 日, Austin (USA).

(10) 安田真也, 諏訪秀磨, 藤堂眞治, ランダムネス存在下における量子相転移の動的臨界指数測定, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 17 日, 関西大(吹田, 大阪).

(11) Synge Todo and Hidemaro Suwa, Geometric Allocation Approaches in Markov Chain Monte Carlo, Joint Workshop on Physics UT and ENS, 2014 年 12 月 9 日, Paris (France).

(12) 藤堂眞治, 物質科学シミュレーションのポータルサイト「MateriApps」/強相関電子系・スピン系の汎用シミュレーションソフトウェア「ALPS」, 物性研究所計算物質科学研究センター第 4 回シンポジウム, 2014 年 11 月 12 日, 物性研(柏, 千葉) (招待講演).

(13) Synge Todo, K-computer study of quantum phase transitions in two-dimensional magnets, Cooperation in Physics Workshop: UT-LMU, 2014 年 10 月 28 日, Munich (Germany).

(14) 藤堂眞治, 物質科学シミュレーションのポータルサイト「MateriApps」/強相関電子系・スピン系の汎用シミュレーションソフトウェア「ALPS」, 第 1 回「京」と大型実験施設との連携利用シンポジウム, 2014 年 9 月 2 日, 秋葉原 Next-1(千代田区, 東京) (招待講演).

〔その他〕

ホームページ等

<http://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ja>

<http://ma.cms-initiative.jp>

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

<http://alpscore.org>

<https://github.com/wistaria/worms/>

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/hphi>

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/komega>

6 . 研究組織

(1) 研究代表者

藤堂 眞治 (Todo, Synge)

東京大学・大学院理学系研究科・准教授
研究者番号 : 10291337