

平成21年 5月29日現在

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2007～2008

課題番号：19540403

研究課題名（和文） DMRGと量子熱浴 - 原理と応用 -

研究課題名（英文） DMRG and Quantum Heat Bath - Principles and Applications -

研究代表者

西野 友年（NISHINO TOMOTOSHI）

神戸大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号：00241563

研究成果の概要：

1次元量子系を2つの部分に分けて取り扱う場合、両者の量子相関はエンタングルメントと呼ばれる物理量によって記述でき、その定量評価は量子エントロピーによってなされる。1次元量子系の背後にある2次元古典系を、いわゆる古典・量子対応を通じて考察した結果、負の曲率を持った2次元古典系が対応する場合には量子エントロピーが抑えられることが判明した。また、正方形領域の分配関数と行列積変分関数の関係より、積波動関数を効率良く生成する計算アルゴリズムを開発した。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2008年度	1,300,000	390,000	1,690,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎論

キーワード：DMRG, 繰込み群, 双曲平面, 量子エントロピー, 臨界現象, 普遍性, 角転送行列

1. 研究開始当初の背景

1次元量子系の基底状態を、ある瞬間に2つの部分に切り分けると、孤立したそれぞれの部分系はある有限な温度を持つ状態として記述できることが知られていた。この現象が意味することは、純粋状態である基底状態の中に、混合状態が隠れている事実である。

2つの部分系は、互いに「量子熱浴」として他方と結合していると考えても良い。これは、局所操作と古典通信では実現し得ない、エンタングルした状態と共通した特徴であり、量子情報理論の分野で先に定義された量子エントロピーが、基底状態の物理的な性質にも重要であることを示唆していた。

2. 研究の目的

1次元量子系の基底状態に内在される量子相関を、量子エントロピーなどの新しい観点から解析することが研究の目的である。一様で無限に長い系をそのまま取り扱うのではなく、相互作用定数に空間依存性が入っている場合を扱ったり、量子古典対応を通じて2次元古典系上で量子相関の対応物を検討するなど、観察の切り口を変えてみることで、研究目的の達成に重要であると考えられる。1次元量子系のエンタングルメントは、基底波動関数を行列積に分解することによって記述することも可能である。この表現についても、同様に条件の変化に対する応答を得ることが大切である。

3. 研究の方法

非一様な1次元量子系を考えるとはいっても、非一様であれば何でも良い訳ではない。なるべく並進対称性を壊さないような非一様化を探る必要がある。これを目的として、まず一様な2次元古典系から考察を始めた。但し曲率が0である普通の平面に限らず、曲率が正の球面または、曲率が負の双曲平面上に考察の範囲を広げる。このような、曲がった空間上での古典場の相転移は、それ自身が興味深い。

次に、曲がった2次元平面上の古典模型に対応する1次元量子系は何か？を把握する。それは、正弦的に、あるいは双曲的に相互作用定数が空間変調を受けた1次元量子ハミルトニアンによって記述される系である。その基底状態は、相互作用定数が空間変調されているにもかかわらず、並進対称性を保っているはずだ。この点について、行列積波動関数の視点から考察する余地がある。

また、平坦な2次元面上の古典系であって

も、それが有限領域にあった場合に、量子古典対応が考えられるか？という基礎的な問題も残っている。これについても、密度行列繰込み群の立場から考察する。

4. 研究成果

双曲平面上の規則格子は双曲タイリングと呼ばれる。このような格子上の古典統計モデルが、どのような相転移を示すかについて、まず Ising Model の磁性・非磁性相転移から解析した。その結果、転移は平均場的であり、空間のハウスドルフ次元が臨界現象の普遍性に重要であることが判明した。[論文5] 相互作用が競合している場合には、3重臨界点が現れ、これは平均場近似では予測出来ないこと、また、ベータ近似と定性的に一致することが判明した。[論文3] 双曲平面上のクロック模型においても同様の解析を行い、6クロック模型など平坦面上ではBKT転移を示す模型についても、双曲平面上では平均場的な相転移となることが判明した。[論文4]

これらのデータ解析においては、密度行列繰込み群の変型である「角転送行列繰込み群」を、双曲平面上の格子に合わせて計算アルゴリズムを修正して用いた。[論文6] 双曲格子上では、数値計算の対象となる系のサイズに対してサイト数が指数的に急増するので、モンテカルロ・シミュレーションによるデータ評価は難しいことには注目すべきである。

双曲平面上の2次元古典系に対応する1次元量子系は、相互作用定数が双曲変型を受けたものになる。このような系を密度行列繰込み群で取り扱う手法をまず開発した。[論文1] 基底状態は、予想した通りほぼ一様となり、対応する行列積状態も一様となる。また、量子エントロピーは双曲変型の強さと

もに減少して行く事が判明した。この計算の拡張として、1次元量子系の励起ギャップを精密に評価する手法を開発中である。

1次元量子系については、この他に指数変型と球変型について考察した。指数変型は、対数うずまき上の古典統計模型に対応するもので、エネルギースペクトルが解析的に予測できるという特徴を持つ。とくに、自由フェルミ系では、固有状態が直交ウェーブレットとなる。球変型では、基底エネルギーの有限サイズ補正が、周期境界条件のそれと一致することが確認された。これらの発展的な研究については、今後も推進して行きたい。

有限領域上の2次元古典系と量子系の対応について考察すると、実は Baxter による角転送行列の取り扱いが、まさにそのものとなっている。この点を軸に、密度行列繰込み群の変型である積波動関数繰込み群との関係を調べた。その副産物として、従来よりも高速に、高精度に熱力学極限を計算できる、新しい積波動関数繰込み群のアルゴリズムが得られた。[論文2]

なお、テクニカルレポートであるという理由により出版しなかった成果の1つとして、実時間密度行列繰込み群の背景にある最小作用の法則の確立を追記しておく。

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6件)

(1) Hiroshi Ueda and Tomotoshi Nishino, Hyperbolic Deformation on Quantum Lattice Hamiltonians, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2008) 014001 (1-5), 査読有り

(2) Hiroshi Ueda, Tomotoshi Nishino, and Koichi Kusakabe, Two-Site Shift Product Wave Function Renormalization Group Method Applied to Quantum Systems, J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 114002 (1-7), 査読有り

(3) Roman Krccmar, Takaaki Iharagi, Andrej Gendiar, and Tomotoshi Nishino, Tricritical Point of J1-J2 Ising Model on Hyperbolic Lattice, Phys. Rev. E 78 (2008) 061119 (1-7), 査読有り

(4) Andrej Gendiar, Roman Krccmar, Kouji Ueda, and Tomotoshi Nishino, Phase Transition of Clock Models on Hyperbolic Lattice Studied by Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method, Phys. Rev. E 77 (2008) 041123 (1-5), 査読有り

(5) Roman Krccmar, Andrej Gendiar, Kouji Ueda, and Tomotoshi Nishino, Ising Model on Hyperbolic Lattice Studied by Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method, J. Phys. A: Math. Theor. 41 (2008) 215001 (1-9), 査読有り

(6) Kouji Ueda, Roman Krccmar, Andrej Gendiar, and Tomotoshi Nishino, Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method Applied to the Ising Model on the Hyperbolic Plane, J. Phys. Soc. Jpn. 76 (2007) 084004 (1-5)

[学会発表] (計 1 件)

(1) 西野 友年, 双曲平面上で角転送行列
繰込みやってみよか, 日本物理学会, 2008 年
3 月 19 日, 鹿児島大学

[その他]

ホームページ等

<http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/DMRG.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

西野 友年 (NISHINO TOMOTOSHI)
神戸大学・大学院理学研究科・准教授
研究者番号: 00241563

(2) 研究分担者

該当なし

(3) 連携研究者

該当なし

(4) 海外共同研究者

Andrej Gendiar
スロバキア科学アカデミー・研究員