

平成 22 年 6 月 3 日現在

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2007～2009

課題番号：19740237

研究課題名（和文） 対称性の低下をともなわない奇妙な連続相転移の探求

研究課題名（英文） Exploring the unconventional continuous phase transition between unrelated symmetry breaking phases

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

研究成果の概要（和文）：自然界によく見られる連続相転移現象は一般にランダウ・ギンツブルグ・ウィルソンのパラダイムで説明されるが、それに属さない対称性の低下をともなわない奇妙な連続相転移現象を探求するために、高効率な計算アルゴリズムの研究を行い、それをを用いた準1次元 SU(N)モデルの大規模な量子モンテカルロシミュレーションを行った。その結果、SU(3)モデルと SU(4)モデルで Valence-bond-solid 相と SU(N)対称性の破れた相の間の量子相転移があり、それが対称性の低下を伴わない連続相転移である可能性を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：Continuous phase transition is a well-known phenomena and, in general, it can be explained by the Landau-Ginzburg-Wilson paradigm. In order to explore numerically another new type of continuous phase transition in quantum systems, we first studied new quantum Monte Carlo algorithms for high performance samplings. Using those high performance algorithms, we have done large-scale quantum Monte Carlo simulations for the quasi-one-dimensional SU(N) quantum models and we found the possibility of continuous quantum phase transitions between valence-bond-solid state and SU(N) symmetry breaking state for the N=3 and 4 cases. Each of them is not a symmetry breaking state of other one.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	2,200,000	0	2,200,000
2008年度	500,000	150,000	650,000
2009年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,200,000	300,000	3,500,000

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)

キーワード：計算物理学

1. 研究開始当初の背景  
連続的相転移現象についてはランダウ・ギンツブルグの秩序パラメータの自由エネルギー理論

とウィルソンの繰り込み群の理論などにより、秩序パラメータの揺らぎが相転移点で発散し系の対称性が自発的に破れ(低下し)秩序相が出現

する現象として理解されており、物性物理にとどまらずさまざまな臨界現象を理解する強力なパラダイムを提供している。しかしながら、近年、このランダウ・ギンツブルグ・ウィルソンのパラダイム、つまり、対称性の高い状態からその一部が破れた低い対称性への転移としてとらえる事ができない量子系の連続相転移現象があるのではないかという問題提起がなされており高い関心を集めている。ただ、今のところ、具体的なマイクロな統計力学的モデルは確立しておらず、活発な数値的、理論的な研究が行われている。

## 2. 研究の目的

対称性の低下をともしなわない奇妙な連続相転移現象を起こす新しい理論モデルの探求を行い、発見する事で、相転移現象研究の新しいパラダイムの基礎を確立する。

## 3. 研究の方法

先行研究において、奇妙な連続相転移現象の存在が提案されている量子強相関モデル(例、準1次元 S=1 bilinear-biquadratic モデルや準1次元 SU(N)モデルなど)に対して、量子モンテカルロ法を用いた数値シミュレーションを行い、これらのモデルにおける量子相転移現象の解析を行う。特に、従来試みられていなかった新計算手法と大規模な計算環境の利用を積極的に行い、従来のシミュレーションでは困難であった量子相転移現象の詳細な解析を行う。

## 4. 研究成果

(1) 空間の並進対称性の破れた valence-bond-solid (VBS) 相のモンテカルロシミュレーションでは、異なる空間パターン間の状態遷移が、従来よく用いられてきた一般的な量子モンテカルロ法ではおきず、サンプリングに偏りが生じる。その結果、計算結果の精度に関して著しい低下が起きていた。本研究では VBS 相と磁気秩序相の境界付近でのモンテカルロシミュレーションを行う必要があるため、VBS 相におけるサンプルの凍り付き問題は深刻な影響をもたらす。そこで、まず、古典系のスピングラス系などのサンプルの凍り付き問題に対してよく用いられている(サンプリングアンサンブルの拡張を行う)拡張アンサンブル法の量子版について研究を行い、以下の成果を得た。これらの成果を用いて、本研究課題が対象とする VBS 状態に関する量子相転移現象の精度の高いモンテカルロシミュレーションが可能となった。

①量子拡張アンサンブル法でのサンプルのアンサンブル空間における局所拡散速度の普遍的な性質を解析的に明らかにした。これは、結合定数展開をもとにした拡張アン

サンプル法一般に見られる特性であり適用範囲は広い。具体的には、拡散係数が結合定数の展開次数に比例して増加するという性質を係数も含めて解析的に導出した。図1では、本研究により理論的に予想される局所拡散係数と1次元 S=1 bi-quadratic モデルで局所拡散係数を比較してプロットしている。

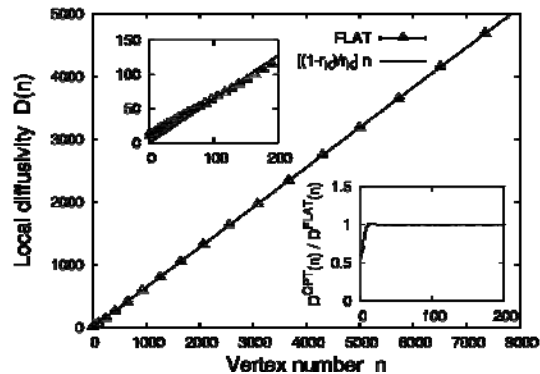


図1. 1次元S=1 bi-quadratic モデルの局所拡散係数と理論予想値の比較。横軸は展開次数、縦軸は局所拡散係数を表す。実線が予想値。鎖長は128とした。左インセットは小さな展開次数領域を拡大した物。右インセットはフラット分布と本研究で提案する分布での拡散係数の比をプロットしている。

この結果より局所拡散係数の振る舞いが本研究成果の予想式とよい一致を示す事が確認された。また、この予想式は、拡張アンサンブル空間でのサンプルの出現分布として、フラットな分布を仮定して導出したがかなり形状の異なる出現分布の元でもよい一致を示すことを明らかにした。

②拡張アンサンブル法のサンプルが拡張アンサンブル空間の端から端まで移動する平均時間、平均初期通過時間(First-passage time)の振る舞いを、拡張アンサンブル空間の拡散過程として、局所拡散係数が変化するフォッカー・プランク方程式を用いて記述し解析を行った。初期通過時間はサンプルが拡張したアンサンブル空間を端から端まで移動する時間を表すので、シミュレーションの精度を高めるためには、行きと帰りの両方向の総初期通過時間が小さくなるようなサンプルの出現分布が望ましい。本研究では、フォッカー・プランク方程式と局所拡散係数の普遍的性質を組み合わせる事で、両方向の初期通過時間の和を最小にする最適化分布を導出する事ができた。その結果、従来用いられていたフラット分布が最小総初期通過時間の観点から最適でない事、さらに、展開次数の平方根の逆数に比例する分布が最適である事を示す事ができた。その応用例として、1次元 S=1 bi-quadratic モデルにおける初期通過時間について、従来のフラット分布を用いた

場合と本研究で提案する分布を用いた場合とを比較した。このモデルの基底状態は VBS 状態である事がわかっており、拡張アンサンブル法の適用が望ましい系である。図 1 は両分布での初期通過時間のシステムサイズ依存性を表す。

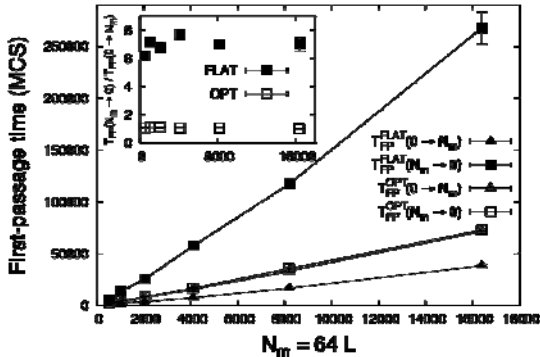


図 2. 1 次元 S=1 bi-quadratic モデルの初期通過時間：フラット分布(FPT)、提案する分布(OPT)。横軸は系の鎖長、縦軸は各初期通過時間の平均値を表す。インセットでは往復の初期通過時間の比を示している。

この結果より、本研究で提案する分布では、両方の初期通過時間に偏りがなく、且つ、総初期通過時間も従来のフラット分布と比べて約半分になっている事が明らかである。

(2) SU(2) 反強磁性ハイゼンベルグモデルを拡張した SU(N) 反強磁性ハイゼンベルグモデルの量子相転移現象に関して、量子モンテカルロ法を用いた数値的研究をおこなった。特に、1次元系と2次元系で基底状態が VBS 相と SU(N) 磁性相と異なる SU(3) モデルと SU(4) モデルを取り上げた。これらのモデルを取り上げた理由は、(i) SU(3) モデルが先行研究において奇妙な量子相転移現象を示すと議論されている S=1 bilinear-biquadratic モデルの1種である事、(ii) 高効率な量子モンテカルロ法の一つの non binary ループアルゴリズムが適用可能である事、(iii) 量子拡張アンサンブル法が適用可能である事である。本研究から以下の成果を得た。

①精度の高いモンテカルロシミュレーションを行うために、本研究では、SU(N) モデルに適した拡張アンサンブルを組み合わせたループアルゴリズムを考案した。まず、通常の温度に関する拡張アンサンブルを用いたモンテカルロシミュレーションを行い、その有効性を確かめた。しかし、転移点付近の様子を詳細に解析する場合は転移点付近での多数パラメータセットに対するモンテカルロシミュレーションが必要となり、シミュレーション時間の増加が問題になった。そこで、鎖間の結合の強さに関する拡

張アンサンブルを定義する事で、1度のシミュレーションから絶対零度付近の十分な低温における任意の鎖間結合の結果を得る手法を構築した。鎖間の結合が密である SU(N) 磁性相では non binary ループアルゴリズムにより十分にサンプル間の自己相関時間を小さくできることがわかっているため、このような鎖間の結合に強さに対する拡張アンサンブルが有効である事が示せる。

②上記の新手法を用いて、先行研究で転移点を求めるために使われた磁性秩序や VBS 秩序の異なる長さスケールの相関の比を数値的に求めた。図 3 は転移点付近での準 1 次元 SU(3) モデルの 2 種類の秩序相関比をプロットしている。

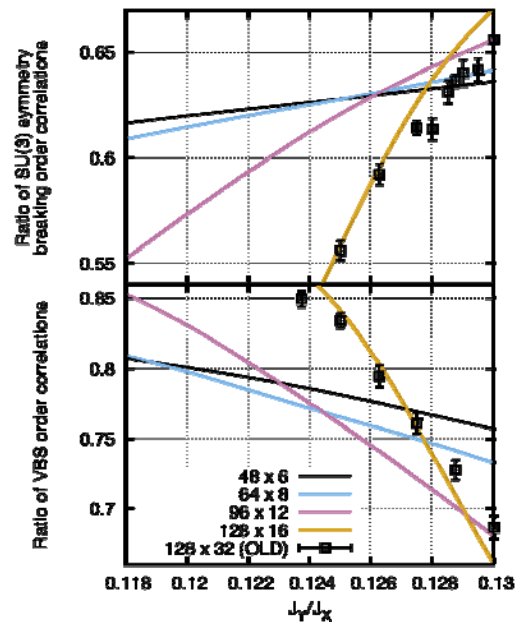


図 3. 準 1 次元 SU(3) モデルの SU(3) 磁性秩序相関比と VBS 秩序相関比。系の格子サイズの縦横(XY)比は 1 : 8 とした。シンボル□は先行研究によって求められた格子の縦横比 1 : 4 の系の相関比を表す。

鎖間の結合の強さに関する拡張アンサンブル法を用いているため、任意の鎖間の結合定数に対する相関比が 1 度のモンテカルロシミュレーション結果から求められる。この図より、先行研究の結果よりも新手法の結果の精度が高められる事が確認できた。準 1 次元 SU(4) モデルの同様の結果と併せて、両モデルとも VBS 秩序相関比や SU(N) 磁化秩序相関比の両方に、転移点付近に大きな有限サイズの補正項が存在し、そのままの 1 つの交点を仮定した有限サイズスケール解析に適さない事がわかった。

③VBS 秩序と SU(N) 磁性秩序両秩序の相関比が定数になる点として、各システムサイ

ズでの有効転移点を定義した。このように定義される有効転移点上の  $SU(N)$  磁性秩序に対応する世界線のワインディングナンバーを数値的に調べた。その結果、ワインディングナンバーはシステムサイズとともに増大するが、増加の傾向はシステムサイズを増すごとに小さくなっていった。これは系が大きくなった場合にワインディングナンバーが定数に収束する可能性を表し、連続的転移と矛盾しない振る舞いである事がわかった。

④  $SU(N)$  磁性秩序に関する同時間クラスター数の分布関数を数値的に求めた。転移点直上では有限サイズのクラスター数の分布関数はべき的な振る舞いを示す。その指数は転移の幾何学的臨界指数で記述できると考えられる。その仮定に基づき解析を行った。特に臨界指数  $\eta$  を導出し、1次転移を示す負の値(-1)ではなく正でかつ通常の数よりも大きい事、 $SU(N)$  帯磁率から求まる  $\eta$  と矛盾しない事を示した。これらの大きな  $\eta$  は非閉じ込め臨界転移の理論的予想と一致している。

## 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1件)

① Kenji Harada and Yuto Kuge, “Diffusion in the Continuous-Imaginary-Time Quantum World-Line Monte Carlo Simulations with Extended Ensembles”, Journal of the Physical Society of Japan, 査読あり, Vol. 77, 2008年. pp. 013001-1

[学会発表] (計4件)

① Kenji Harada, ” Multicanonical Monte Carlo simulations of anisotropic  $SU(3)$  and  $SU(4)$  Heisenberg models”, American Physical Society, March Meeting, 2009. 3. 18, Pittsburgh, PA, USA

② 原田 健自, “準1次元  $SU(N)$  モデルの量子相転移”, 日本物理学会秋季大会、2008. 9. 22、岩手大学

③ 原田 健自, “量子拡張アンサンブル法を用いた Valence Bond Solid 状態のモンテカルロシミュレーション”, 日本物理学会第63回年次大会、2008. 3. 25、近畿大学

④ 原田 健自, “Nematic-VBS 量子相転移に関するマルチカノニカルモンテカルロシミュレーション”, 日本物理学会第62回年次大会、2007. 9. 24、北海道大学

[図書] (計0件)

## 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