

課題名 (タイトル) :

並列化量子モンテカルロ法の開発と格子ボース粒子系における新奇な臨界現象の探索

利用者氏名 : ○正木 晶子

理研での所属研究室名 : 柚木計算物性物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

ボース統計に基づく相互作用する希薄多体原子系の物理的性質は絶対零度における平均場理論を基に古くから発展してきた。現在広く知られているボース・アインシュタイン凝縮の基礎的理論は、1940年代から60年代にかけて精力的に研究され発展したもので、よく知られている理論に、Lee-Huang-Yangによって定式化された、基底状態におけるエネルギーや凝縮体密度などの基本的な物理量の摂動理論がある。しかし近年、Kita-Tsutsuiらによって摂動理論の問題点が指摘されており、量子モンテカルロ法などの数値的手法による精密な解析が求められている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

我々は世界線表示に基づく量子モンテカルロ法を用いてボース原子系を記述できるモデルの数値計算を行った。量子モンテカルロ法は統計物理的知見を用いることで本来天文学的サイズとなるハミルトニアンを統計誤差の範囲で厳密に解くことができる数値計算手法である。本計算ではHOKUSAIを用いた乱数並列計算を行うことで計算時間の短縮及び計算精度の向上を実現した。希薄な領域における物理量の振る舞いは相互作用の詳細によらず、相互作用範囲によってのみ特徴付けられるユニバーサルな振る舞いを示すことが知られている。相互作用範囲とは具体的には、s波散乱長と呼ばれる低エネルギー極限での量子力学的散乱を特徴付ける長さの次元をもつ定数で表される。一般的には解析解は連続的な空間で表現されているが、希薄極限でのユニバーサル性を利用することで、ボース・ハバード模型などの離散模型を用いてもこの性質を確認することができる。

我々は格子系で最も基本的なハードコア・ボー

ス・ハバード模型に対し世界線モンテカルロ法を用いて、また、連続空間で剛体芯ポテンシャルを持つボース粒子模型に対し経路積分モンテカルロ法を用いて計算し、Lee-Huang-Yangなどの先行研究で知られている理論式との比較を行った。

3. 結果

我々はまず数値計算と理論式との比較し、理論式の正当性を確かめた。次に、ユニバーサルな希薄領域において非線形フィッティングを行い、ボース・ハバード模型が固有に持つs波散乱長の値を見積もることができた。(投稿準備のため図と見積もったs波散乱長の具体的な値についてはここでは割愛する。)

4. まとめ

離散空間と連続空間の二種類の量子モンテカルロ計算によって連続空間模型と格子模型を繋ぐs波散乱長の大きさという基本的で重要な物理的スケールの見積もり方法を提案することができた。

5. 今後の計画・展望

現在までの計算では摂動展開式の係数を評価するほどの精度の結果は得られていない。しかしより大規模な並列計算を行えば精密な評価は可能になると期待できる。

また、連続空間における複雑なモデルの量子モンテカルロ計算による第一原理的なシミュレーションは収束が困難であることがわかっている。しかし本研究で示した離散系と連続系の比較方法を用いれば、収束が非常によい離散系の模型を用いることで連続系の模型を計算できると期待される。具体的には2次元ヘリウム系において実験で示唆されているような新奇量子相の有無を明らかにする研究への応用を期待できる。

平成 29 年度 利用研究成果リスト

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Akiko Masaki-Kato and Naoki Kawashima, “Worldline Monte Carlo methods of huge systems”, Proceedings for the 36th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (2017).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. ○正木晶子、「フラストレーションのない $S=1/2$ ハイゼンベルグ模型の励起ダイナミクス — マグノン励起の消失—」, ポスト「京」プロジェクト課題7「共通基盤シミュレーション手法」研究会、2017年6月、柏 (千葉) (招待講演) .
2. ○Akiko Masaki-Kato, “The absence of single magnon excitation and fractional incoherent dynamics in a two-dimensional unfrustrated spin-1/2 antiferromagnet”, 第25回量子シミュレーション研究会, ImPACT「量子人工脳を量子ネットワークでつなぐ高度知識社会基盤の実現」, Saitama (Japan), October (2017). ○Akiko Masaki-Kato, “Worldline Monte-Carlo methods of huge systems”, The 36th JSST Annual International Conference on Simulation Technology, Tokyo (Japan), October (2017) (招待講演) .
3. ○正木晶子, A. S. Mischenko, 白川知功, 永長直人, 柚木清司, 「フラストレーションの無い $S=1/2$ 正方格子ハイゼンベルグモデルの励起ダイナミクス」, 日本物理学会秋季大会、盛岡、2017年9月.
4. ○正木晶子, 本山裕一, 川島直輝, 「ボース・ハバード模型を用いた
5. 連続空間希薄粒子系の数値解析とs波散乱長の見積もり」, 日本物理学会第73回年次大会、野田、2018年3月.