

課題名(タイトル):

テンソルネットワーク法による多体模型の解析

利用者氏名:

○上田 宏(1)

理研における所属研究室名:

(1)開拓研究本部 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

現実の物質における諸性質を説明しうる多体模型の解析は、計算物理の分野において常に重要視されている。多体模型の解析手法として、近年、行列積状態に端を発したテンソルネットワーク法が注目を浴びており、多様な多体模型の低エネルギー物理の理解に役立っている。

本研究課題では、テンソルネットワーク法の高度化、ならびに、それらを利用して物性・統計物理の理解に資する多体模型の解析を行う。実際の物理を説明しうる有効多体模型では、複数の相互作用変数を持つことが多々あり、それらの包括的な調査を効率的に実施するためにスーパーコンピュータの利用が必須となる。また、テンソルネットワーク法は強相関シミュレーションコードと関連深く、一般利用課題 G20015 と連携して課題を遂行している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

2019 年度に引き続き、最近接強磁性的相互作用 J_1 と次近接反強磁性的相互作用 J_2 をもつスピン $S=1/2$ フラストレートスピン鎖の基底状態相図、スピギャップ、横磁場に対する磁化率、相関関数のピッチにおける J_1 のボンド交替依存性をテンソルネットワークの法の一つである iTEBD 法と iDMRG 法を利用して調査した。

本年度ではこれに加えて、正方格子上の離散化されたハイゼンベルグ模型(正 12 面体模型)の統計力学的性質を、テンソルネットワーク法の一つである角転送行列繰込み群(CTMRG)と CTMRG の近似精度を決定する繰込みの状態数 m に関するスケーリング解析を用いて数値的に解析し、相転移の次数及び臨界指数を調査した。本模型は内部自由度が 20 状態と非常に大きいため、CTMRG 計算のボトルネックとなる CTM の対角化並びに行列積演算に対して、大規模固有値計算ライブラリ EigenExa と BLACS がそれぞれ利用できるように並列化された CTMRG を用意した。

3. 結果

[フラストレート量子スピン鎖研究] XXZ 異方性(容易軸側 & 容易面側)及び J_1 のボンド交替性に関して広いパラメー

タ領域で基底状態相図並びに諸物理量(スピギャップ、磁化率、相関関数のピッチ)を解析することに成功した。昨年度からの差分として、ボンド交替極限での有効ハミルトニアンから、4 倍周期($\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$)反強磁性相と(ベクトルカイラル秩序と共存した)対称/反対称的ダイマー相が有効 $S=1$ スピン鎖模型に現れるネール相、ハルデン相、そして Large-D 相と対応するそうであることを明らかにし、それらの相境界に現れる臨界性が数値計算の結果と無矛盾であることを示した。

[正方格子上の正多面体模型解析] 解析の結果、秩序・無秩序の連続相転移が 1 つだけ存在するという先行研究と矛盾のない結果が得られることを確認できた。また、その相転移を特徴づける臨界指数は他の正多面体模型のそれと異なっており、正 20 面体模型に現れる相転移と同様に 2 次元共形場理論のミニマル模型で説明できない(中心電荷 c が 1 よりも大きくなる)ことを明らかにした。

4. まとめ

[フラストレート量子スピン鎖研究] 当該フラストレートスピン鎖に関して包括的な基底状態相図、スピギャップ磁化率、相関関数のピッチの調査し、現れうる臨界性に関して有効模型の解析から定性的な理解が得られた。

[正方格子上の正多面体模型解析] 本研究により正方格子上のすべての正多面体模型に関してテンソルネットワーク法による臨界性の解析が完了し、多面体の自由度が増大するにしたがって、連続相転移が現れる場合は自由度に対して単調に中心電荷の値が大きくなることを数値的に示すことに成功した。

5. 今後の計画・展望

当該フラストレートスピン鎖に関しては J_1 が反強磁性側に関して同様の解析を行うことが考えられる。多面体模型に関しては、離散化に異方性を導入して、等方的な点で非自明な臨界性が現れる起源を探ることが考えられる。

2020 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

- [1] Hiroshi Ueda, S. Onoda, Y. Yamaguchi, T. Kimura, D. Yoshizawa, T. Morioka, M. Hagiwara, M. Hagihala, M. Soda, T. Masuda, T. Sakakibara, K. Tomiyasu, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima, R. Kajimoto, M. Nakamura, Y. Inamura, N. Reynolds, M. Frontzek, J. S. White, M. Hase, Y. Yasui, “Emergent spin-1 Haldane gap and ferroelectricity in a frustrated spin-1/2 ladder”, Phys. Rev. B **101**, 140408(R) (2020) [6 pages] <Editors’ Suggestion>.
- [2] Hiroshi Ueda, S. Onoda, “Roles of easy-plane and easy-axis XXZ anisotropy and bond alternation in a frustrated ferromagnetic spin-1/2 chain”, Phys. Rev. B **101**, 224439 (2020) [16 pages].
- [3] Hiroshi Ueda, Kouichi Okunishi, Seiji Yunoki, Tomotoshi Nishino, “Corner transfer matrix renormalization group analysis of the two-dimensional dodecahedron model”, Phys. Rev. E **102**, 032130 (2020) [8 pages].

【口頭発表】

- [4] 上田宏, “テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化”, さきがけ「革新的な量子情報 処理技術基盤の創出」研究領域 第2回領域会議 2020年4月15日, オンライン.
- [5] 上田宏, “量子計算機に適合したテンソルネットワーク法”, 物性研究所短期研究会「量子多体計算と第一原理計算の新展開」2020年7月9日, オンライン [招待講演].
- [6] 上田宏, 奥西巧一, 柚木清司, 西野友年, “正方格子上の正12面体模型に現れる相転移現象の解析”, 日本物理学会2020年秋季大会 2020年9月10日, オンライン.
- [7] 上田宏, “テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化”, さきがけ「革新的な量子情報 処理技術基盤の創出」研究領域 第3回領域会議 2020年12月18日, オンライン.
- [8] 上田宏, “量子コンピュータのためのテンソルネットワーク入門”, 第6回Q-LEAP量子AIセミナー 2021年2月9日, オンライン.
- [9] 上田宏, 柚木清司, 下川統久朗, “飽和磁化近傍系の物性解析に特化した量子スピンスルバー QS³”, 日本物理学会第76回年次大会(2021年) 2021年3月15日, オンライン.