

# 藤堂研究室

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

シミュレーションで探る量子多体現象

准教授: 藤堂真治 (Synge Todo)

助教: 諏訪秀麿 (Hidemaro Suwa)

研究員: 坂下達哉 (Tatsuya Sakashita)

五十嵐 亮 (Ryo Igarashi)

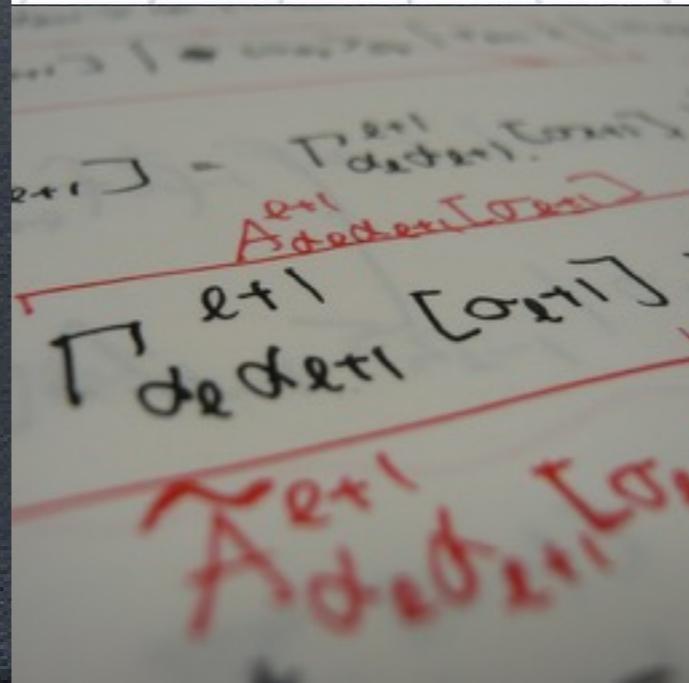
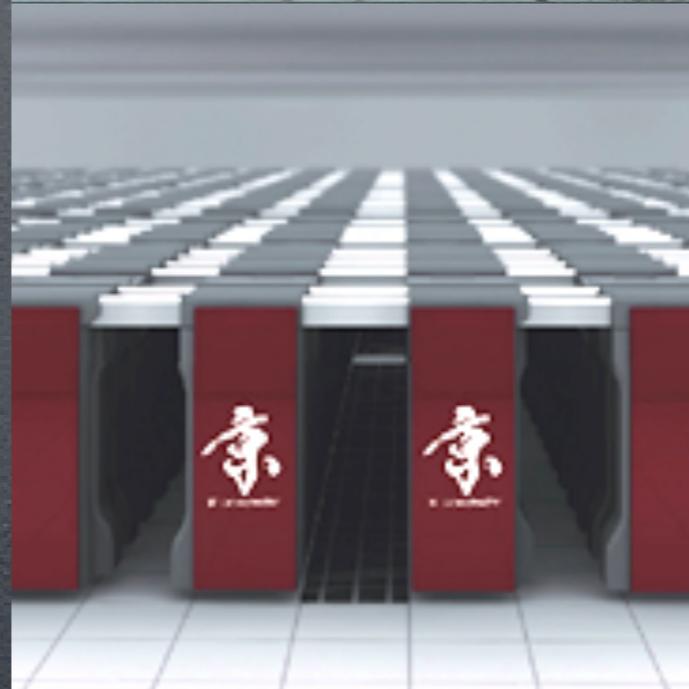
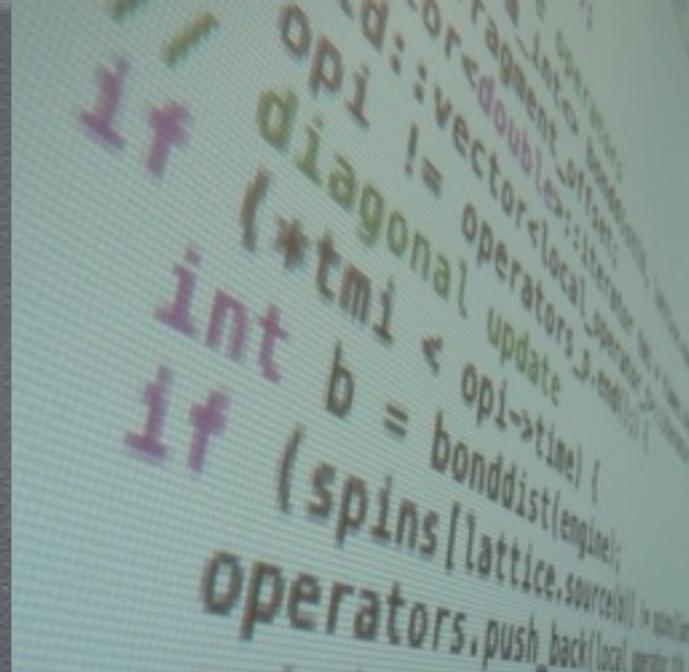
D3: 安田真也 (Shinya Yasuda)

D2: 堀田俊樹 (Toshiki Horita)

M2: 坂川泰章 (Yasuaki Sakagawa)

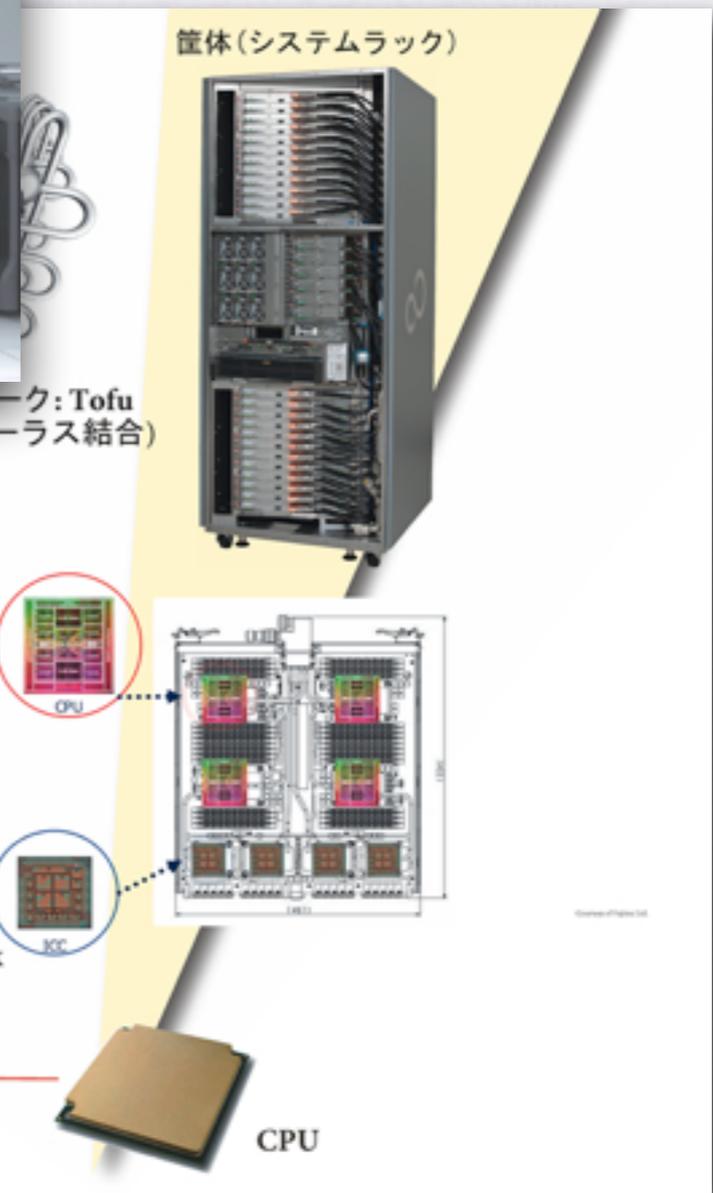
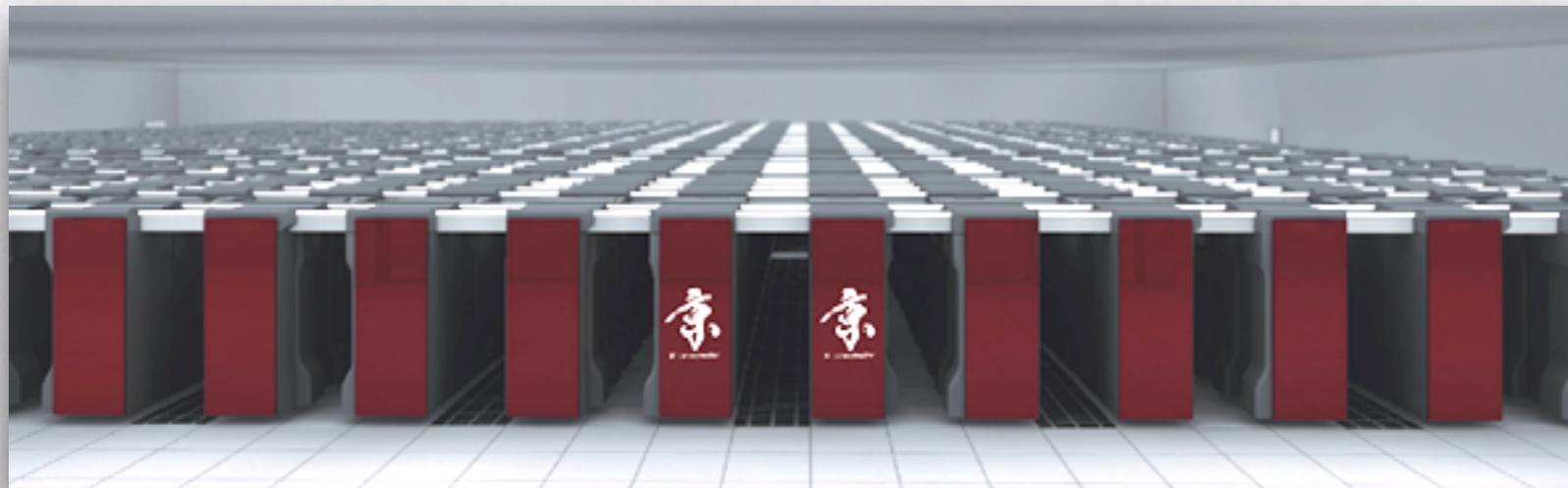
M1: 足立大樹 (Daiki Adachi)

島垣 凱 (Kai Shimagaki)



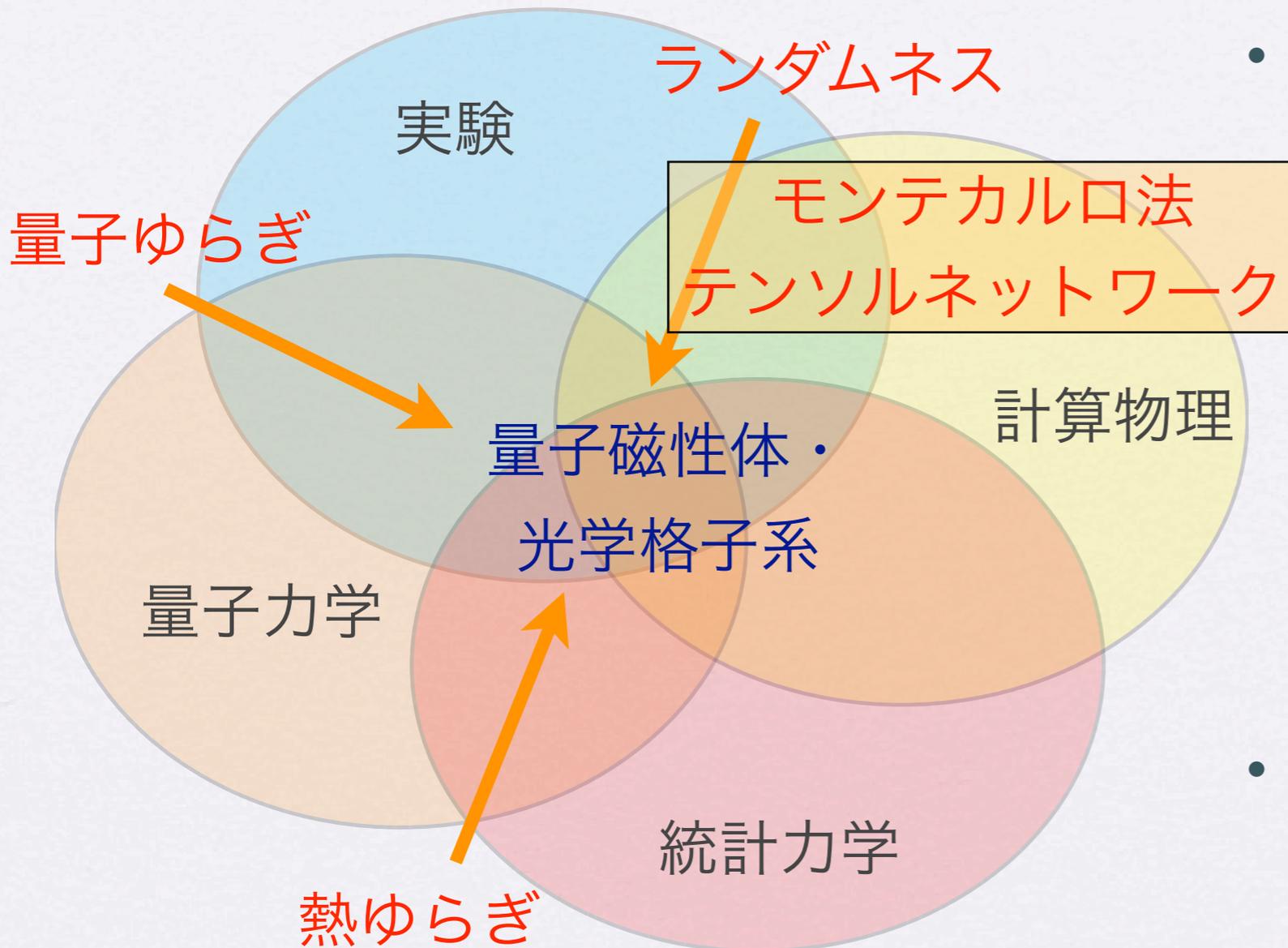
# 「京コンピュータ」

- 2012年6月完成@神戸
- 計算能力: 毎秒1京回 =  $10^{16}$  flops = 10 Pflops (消費電力 13MW)



# 強相関多体系における新奇な状態の探索

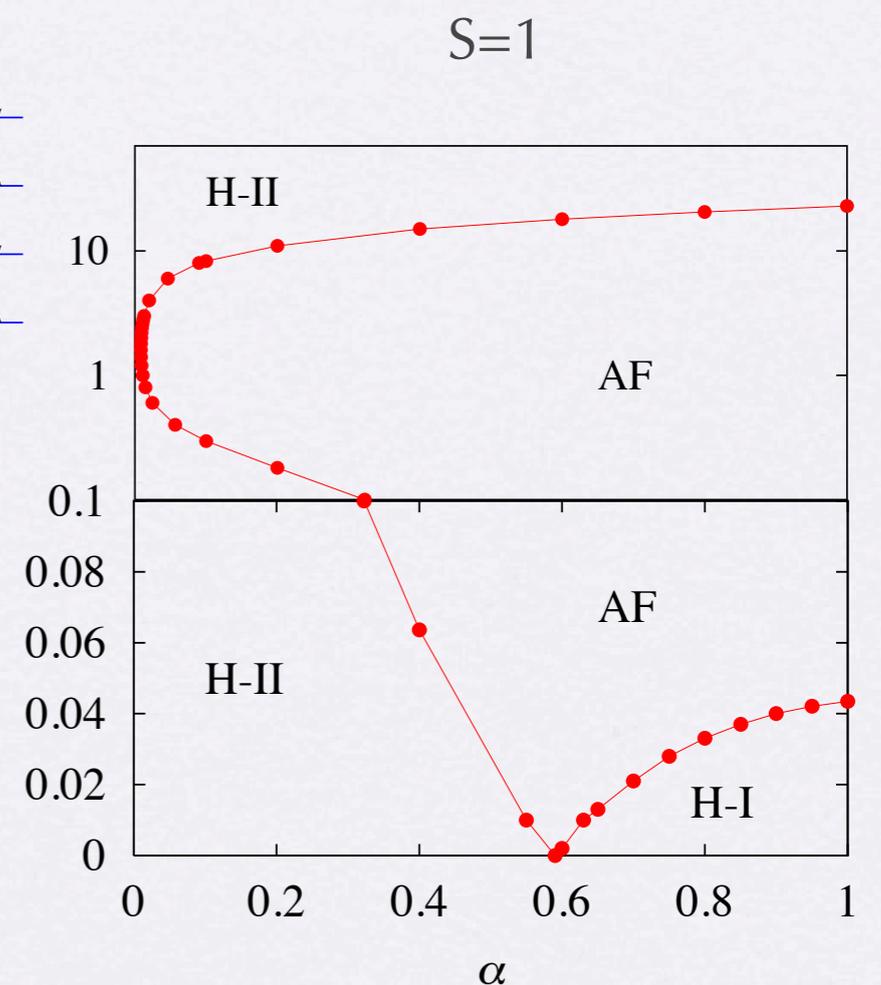
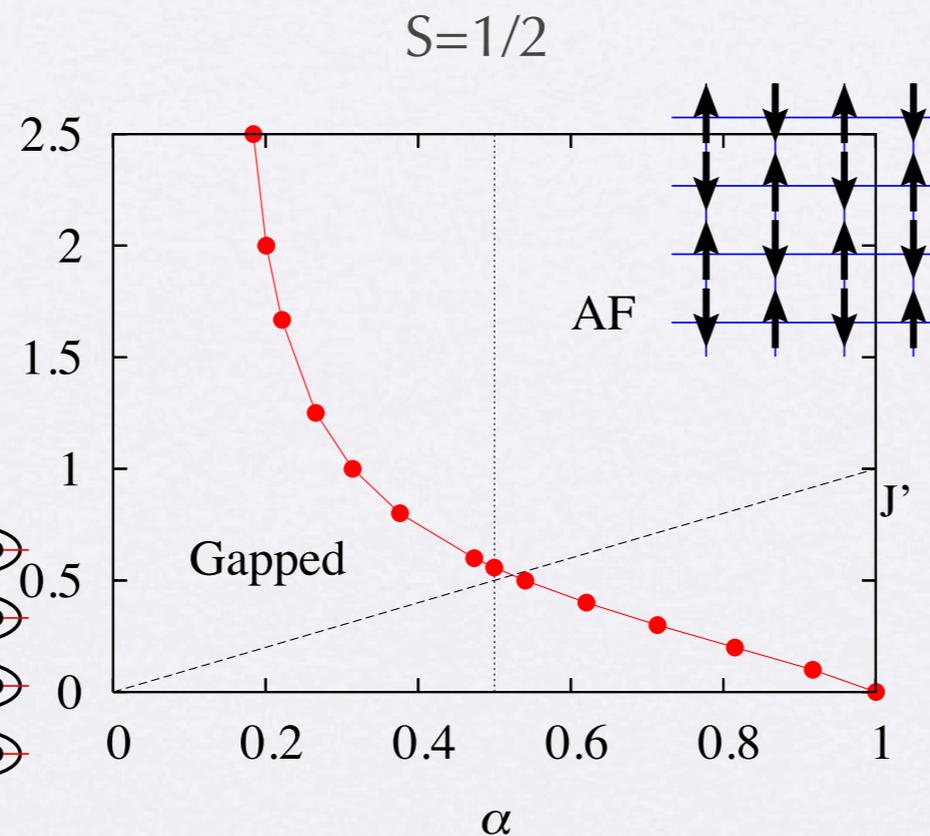
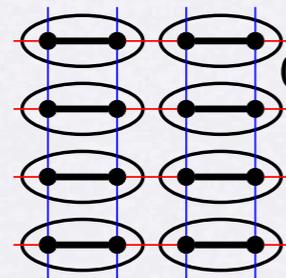
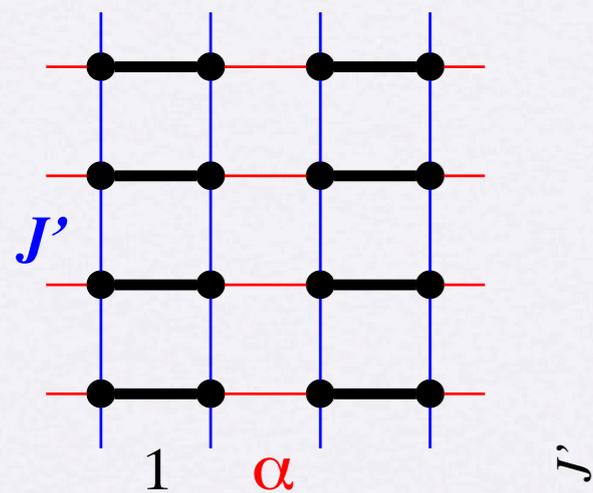
- 新しい量子相・量子相転移
- “形”の効果とランダムネス
  - 強い空間的異方性
  - 端・表面の効果
    - 量子表面相転移
  - 有限サイズ効果
    - ナノ磁性体
- 長距離相互作用の効果
- 格子のゆらぎ
  - フォノンとスピンの相互作用
- 空間・時間的非一様性
  - 輸送現象、非平衡状態



# Quantum phase transition in 2D HAF

- Quantum phase transition from spin-gapped state to AF-LRO phase

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \mathbf{S}_{2i,j} \cdot \mathbf{S}_{2i+1,j} + \alpha \sum_{i,j} \mathbf{S}_{2i+1,j} \cdot \mathbf{S}_{2i+2,j} + J' \sum_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1}$$

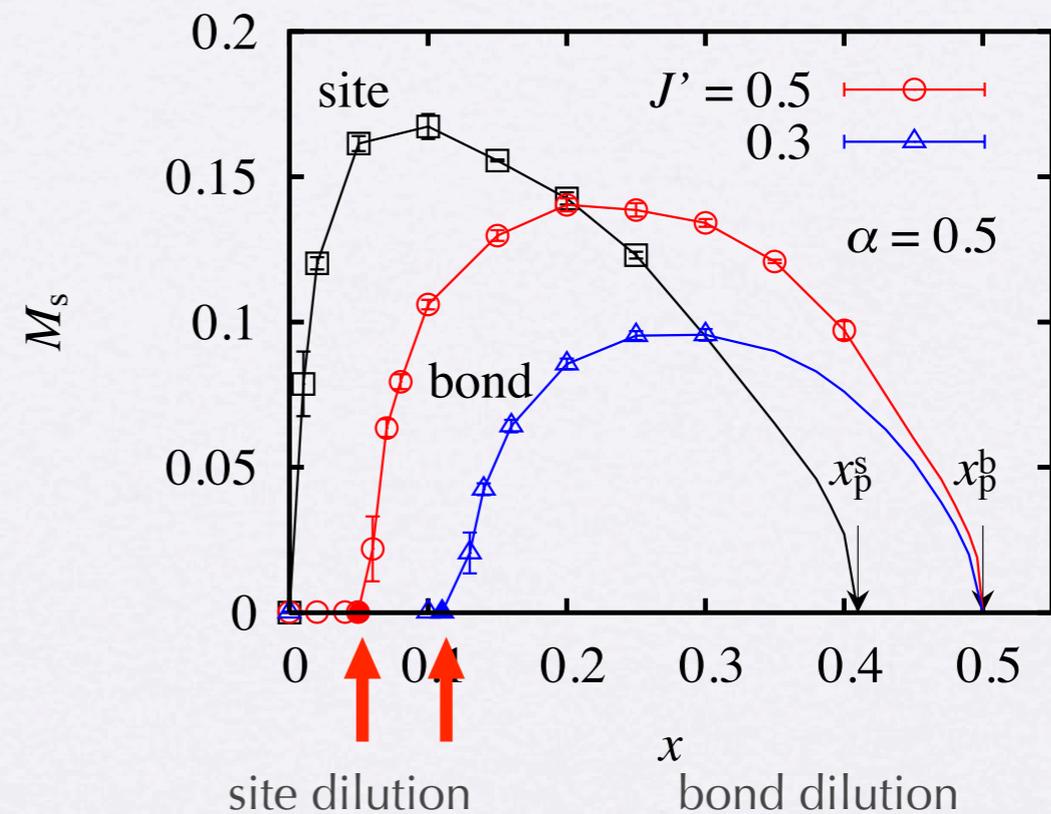
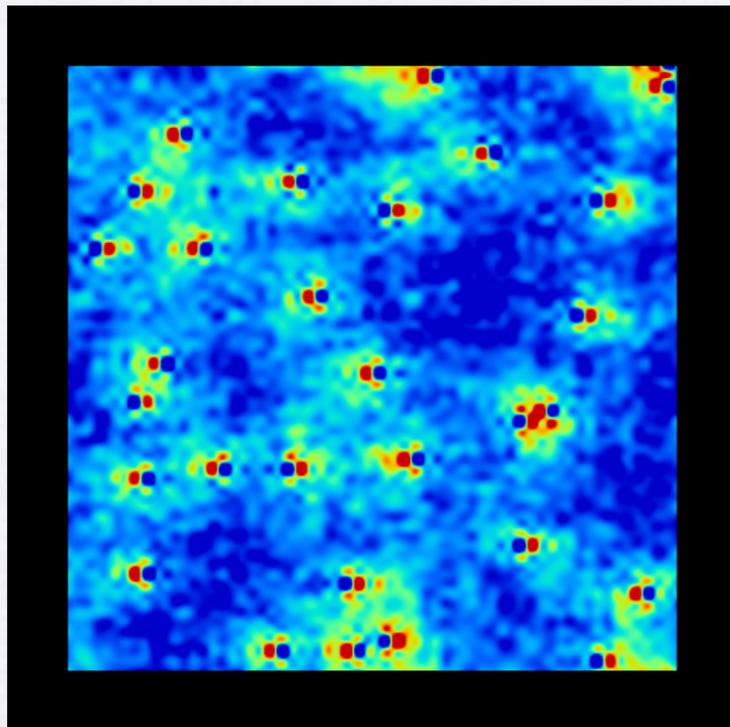


Matsumoto, Todo, et al (2002)

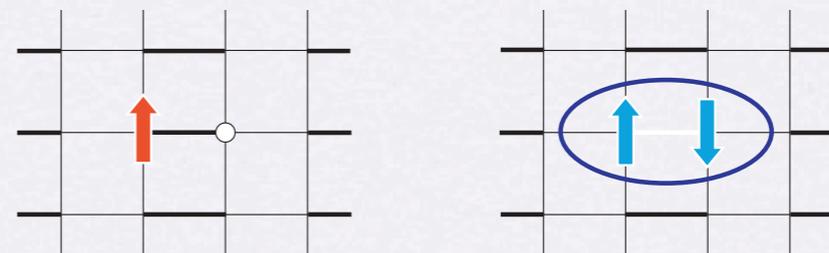
3D Heisenberg (classical  $O(3)$ ) universality

# Impurity induced long-range order

- quantum fluctuations + impurities  $\Rightarrow$  long-range order!
- static dimerization + static impurities



- site or bond randomness
- spontaneous dimerization?
- quantum effects of phonons



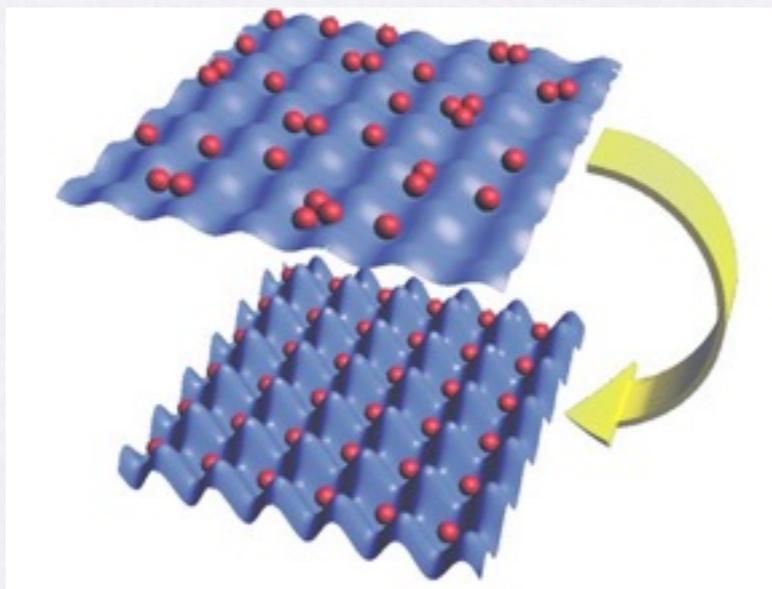
Yasuda, et al (2002), Yasuda et al (2006)

# Supersolid in extended Bose-Hubbard model

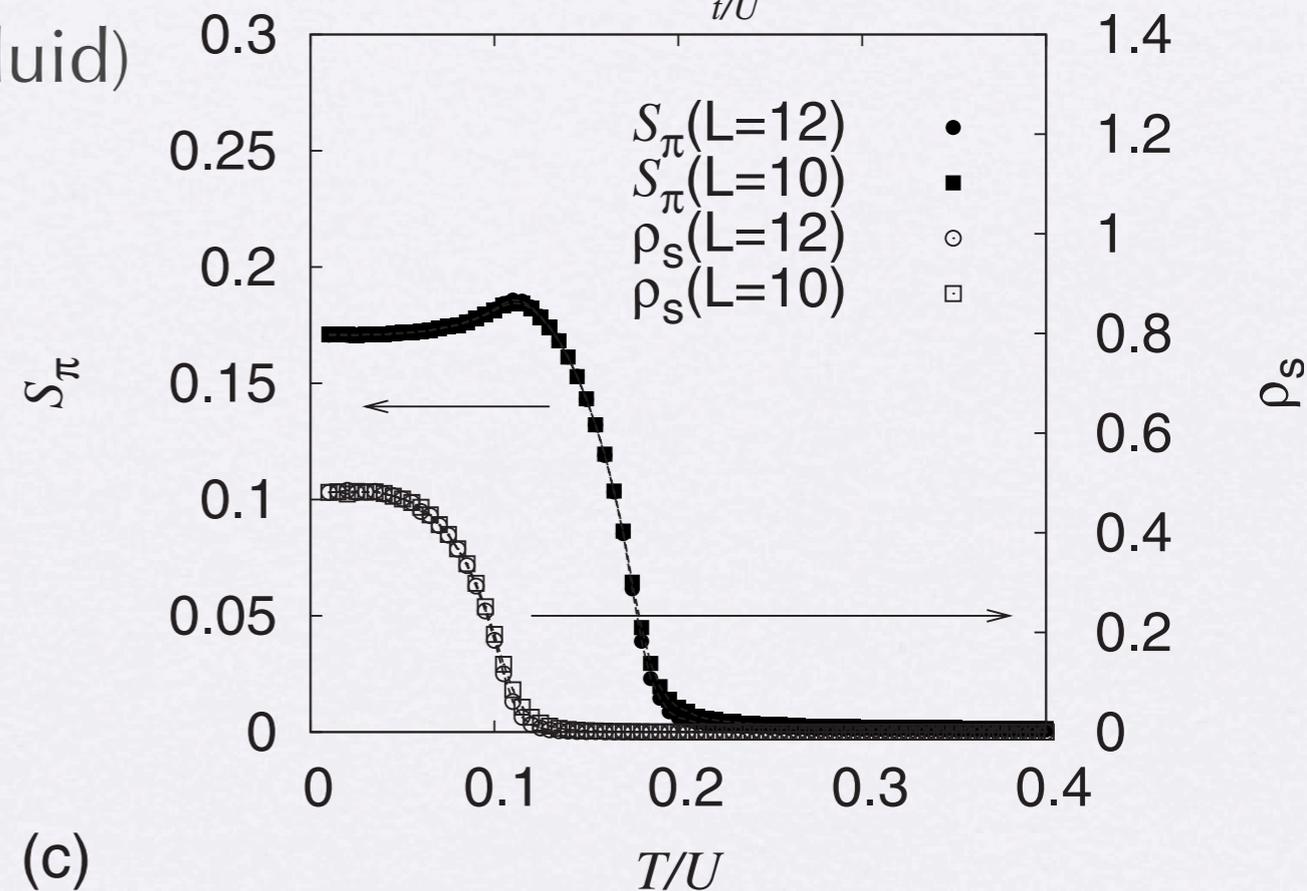
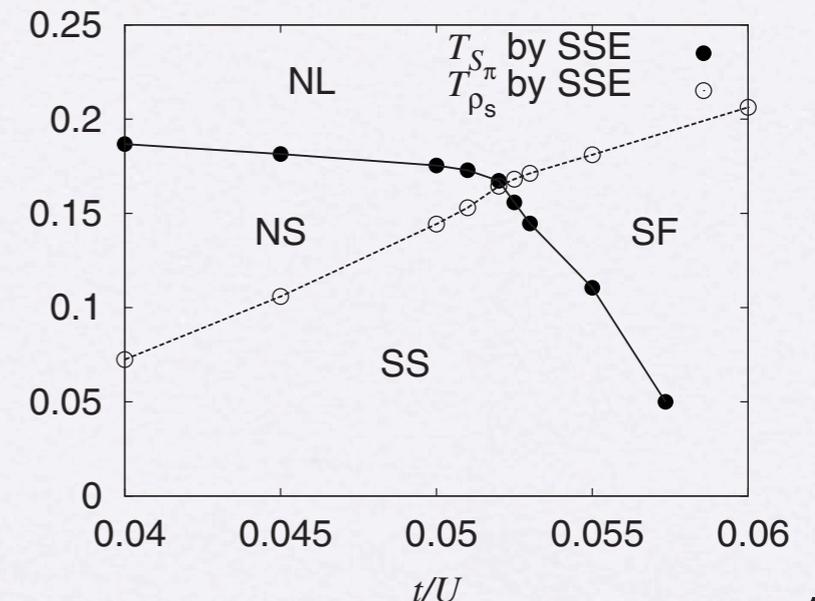
- Interacting soft-core bosons

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \frac{1}{2} U \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad T/U$$

- Supersolid = co-existence of diagonal long-range order (=solid) and off-diagonal long-range order (=superfluid)
- Experimental realization: optical lattice



<http://www.uibk.ac.at/th-physik/qo>

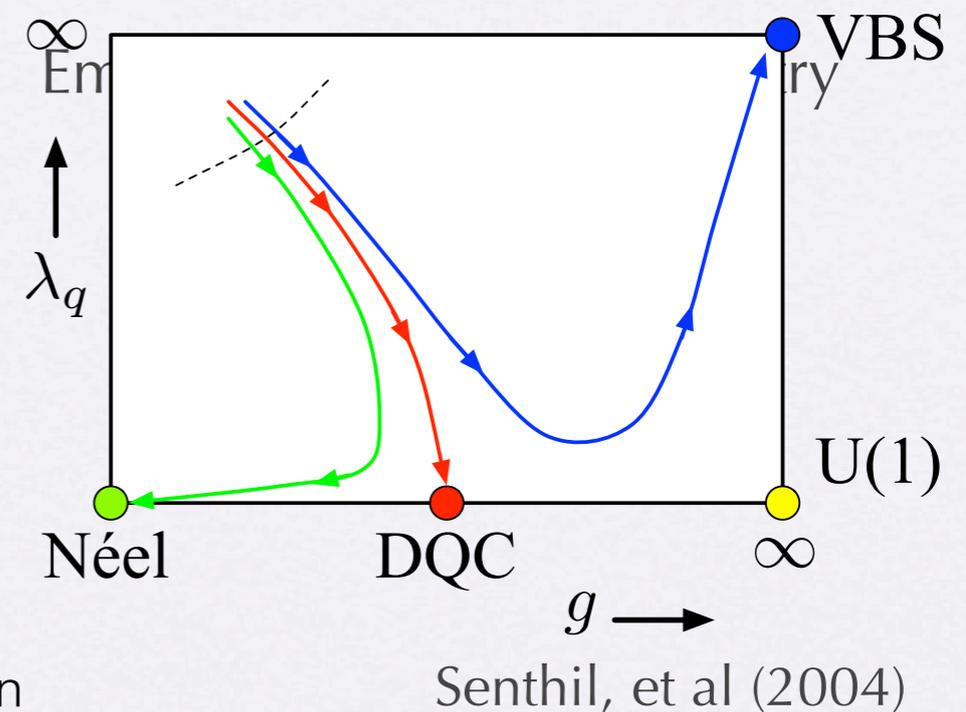
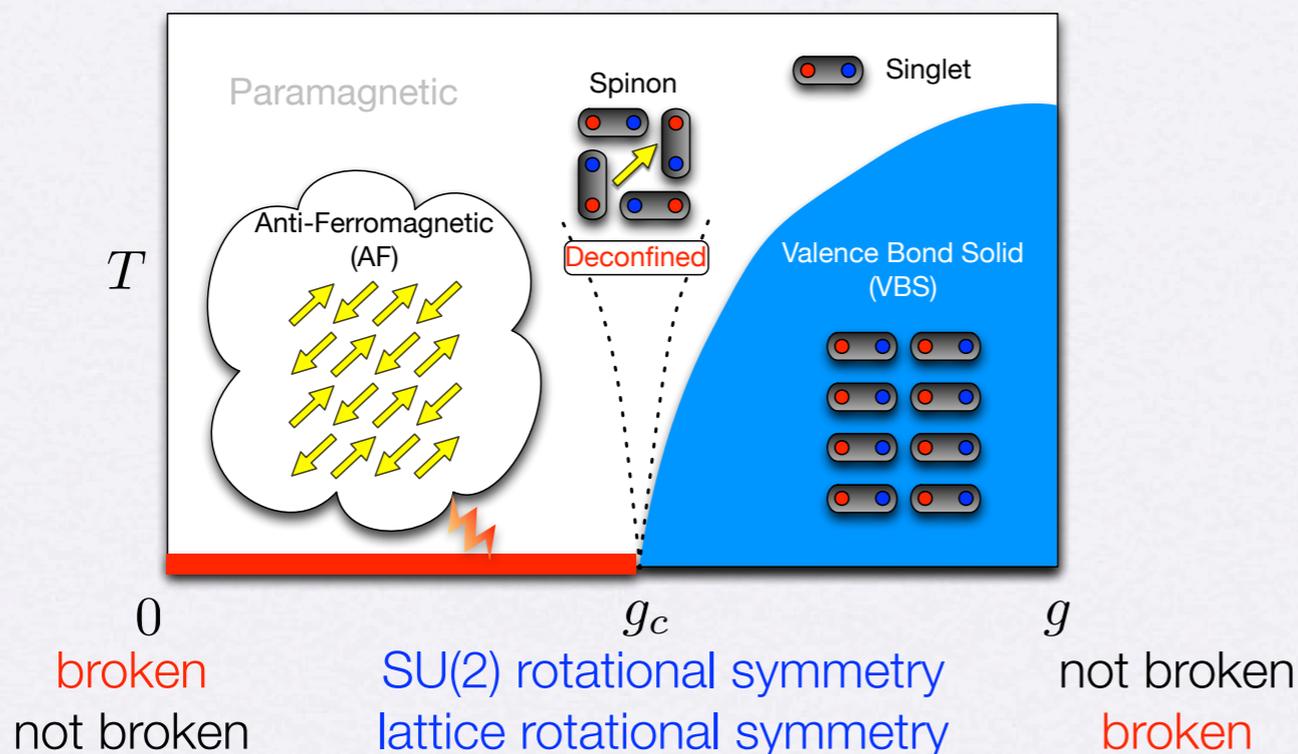


(c)

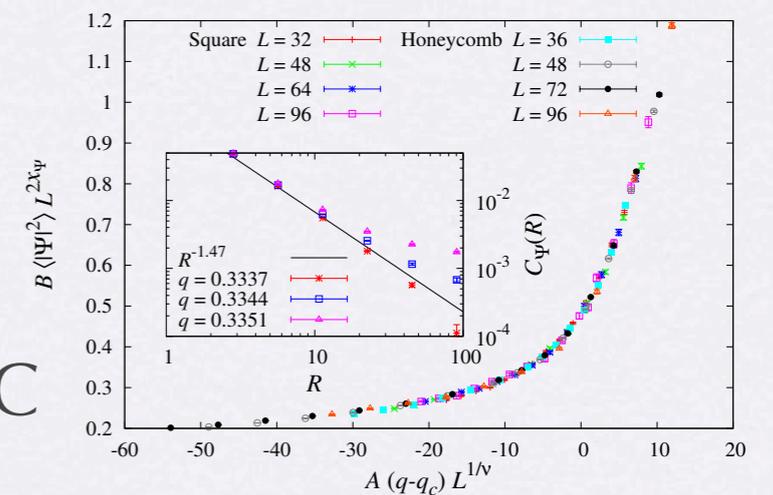
Yamamoto, Todo, Miyashita (2009)

# Deconfined critical phenomena

- Possibility of continuous phase transition between two symmetry broken phases  $\Rightarrow$  Novel critical phenomena due to quantum interference



- SU(2) symmetric NCCP<sup>1</sup> model (Kukulov et al 2008)  $\Rightarrow$  weak 1st order?
- SU(N) J-Q model (Lou et al 2009, Harada, 2013)  $\Rightarrow$  confirmation of DCP scenario by Large-scale QMC

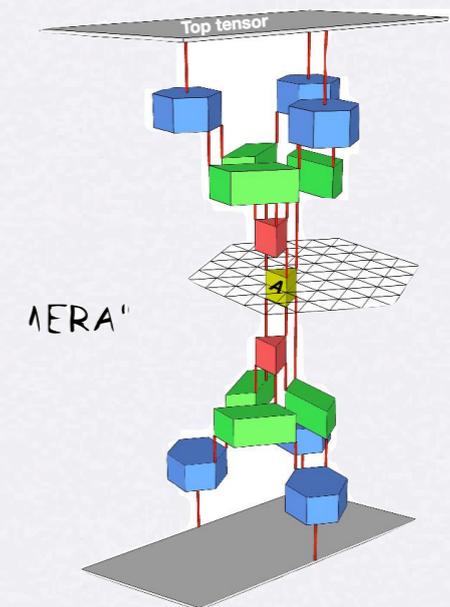


# 計算物理の階層

- どうモデル化するか？
- 問題の定式化、何を見るか？ 何を測るか？
- シミュレーション手法
- アルゴリズム、プログラム開発、実装
- 最適化、並列化
- より高性能なコンピュータ

# 量子多体系に対するシミュレーション手法

- ヒルベルト空間の次元  $\sim$  系のサイズに対して指数関数的に増加
  - 全ての状態を厳密に扱うことは、スパコンを使っても無理
- 物理的に重要な性質を失うことなく、シミュレーションを実行しやすい形へ表現しなおすことが本質的
- 乱択アルゴリズム (randomized algorithm)
  - 虚時間経路積分+モンテカルロサンプリング = QMC
- 情報圧縮
  - 特異値分解による波動関数の低ランク近似 = テンソルネットワーク
  - スパース(疎性)モデリング, LASSO

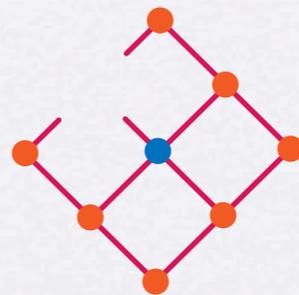
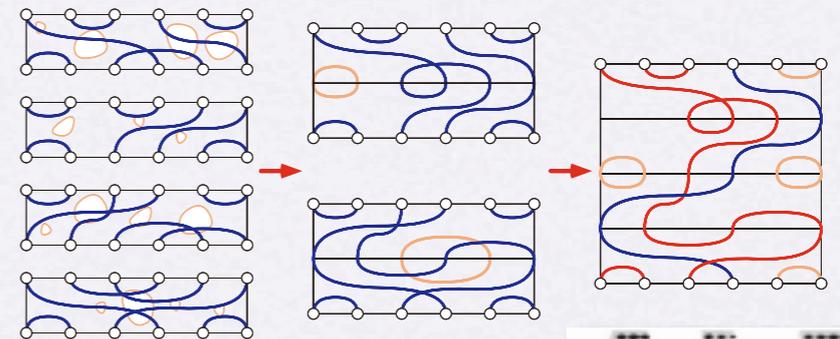
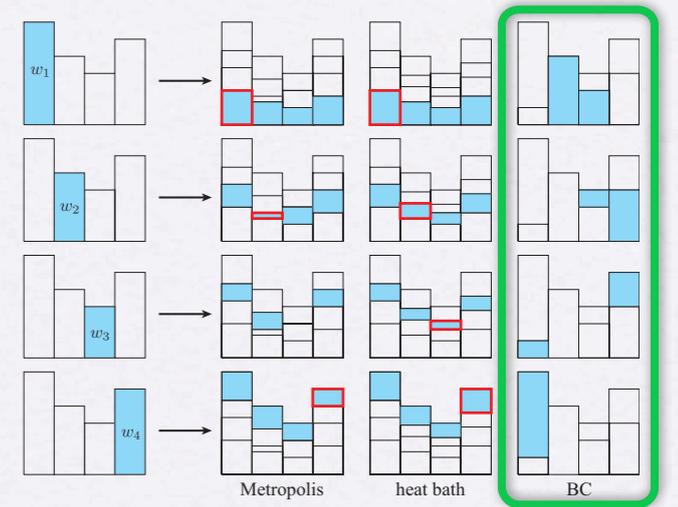


# 大学院における研究テーマの例

- 異方性の強い量子磁性体における相転移の研究
  - 鎖Bethe法の開発、動的異方性制御、不純物効果
- 長距離相互作用をもつ磁性体の研究
  - オーダーNモンテカルロ法の開発、磁気双極子相互作用の効果
- 格子の自由度と結合した量子磁性体の研究
  - 格子結合系に対するモンテカルロ法の開発、スピン-パイエルス転移
- 新奇量子相の探求
  - 連続空間QMCの開発、表面吸着ヘリウム4の示す超固体状態
- 量子多体系におけるトポロジカルな秩序・エンタングルメントの研究
  - 量子モンテカルロによるエンタングルメントエントロピーの測定
  - 秩序変数としての局所ベリー位相
- 物質科学シミュレーションの基礎原理の研究
  - 詳細つりあいを必要としないモンテカルロ法、テンソルネットワーク

# 藤堂研で研究・開発しているアルゴリズム とソフトウェア

- 古典/量子マルコフ連鎖モンテカルロ法 ([looper](#), [worms](#))
  - 詳細つりあいを必要としないモンテカルロ法 ([BCL](#)ライブラリ)
  - 長距離相互作用系に対する $O(N)$ 法
  - Spin-Peierls 系(粒子数の保存しない系)に対するワームアルゴリズム)
  - 連続空間量子モンテカルロ法(ワームアルゴリズム)
  - Stochastic Approximationとの組み合わせ
- 厳密対角化法
  - [Rokko](#): 大規模並列対角化ライブラリ
- テンソルネットワーク法
- [ALPS](#): Applications and Libraries for Physics Simulations
  - 強相関量子格子模型のためのオープンソースソフトウェア
- [MateriApps](#): 物質科学シミュレーションのポータルサイト
  - [MateriApps LIVE!](#) オープンソースソフトウェアを収録したライブLinux



成し遂げたいこと

負符号問題の解決