

藤堂研究室

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

准教授: 藤堂眞治 (Synge Todo)

特任講師: 大久保 毅 (Tsuyoshi Okubo)

助教: 諏訪秀麿 (Hidemaro Suwa)

特任研究員: 白井達彦 (Tatsuhiko Shirai)

D2: 足立大樹 (Daiki Adachi)

島垣 凱 (Kai Shimagaki)

D1: 石川文啓 (Fumihiro Ishikawa)

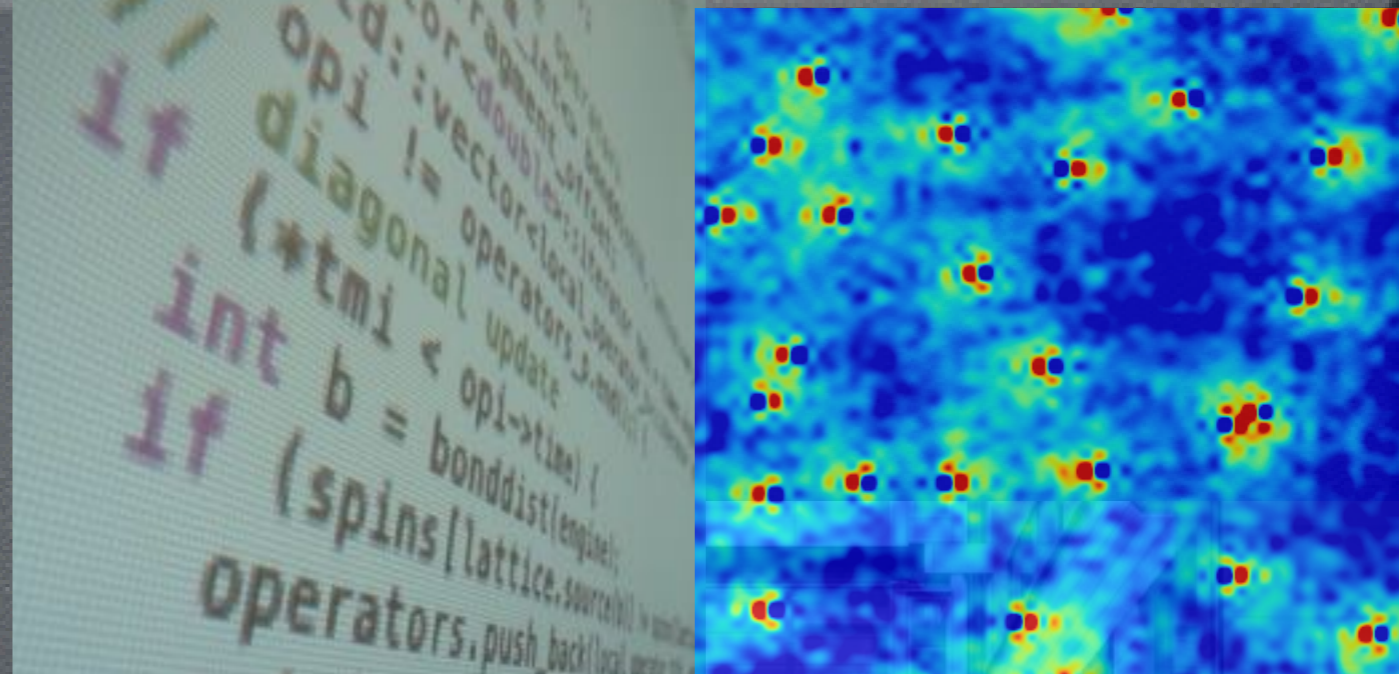
山本卓矢 (Takuya Yamamoto)

M2: 鈴木基己 (Motoi Suzuki)

中西 健 (Ken Nakanishi)

M1: 近藤千尋 (Chihiro Kondo)

本資料は藤堂研「講義」ページからダウンロード可

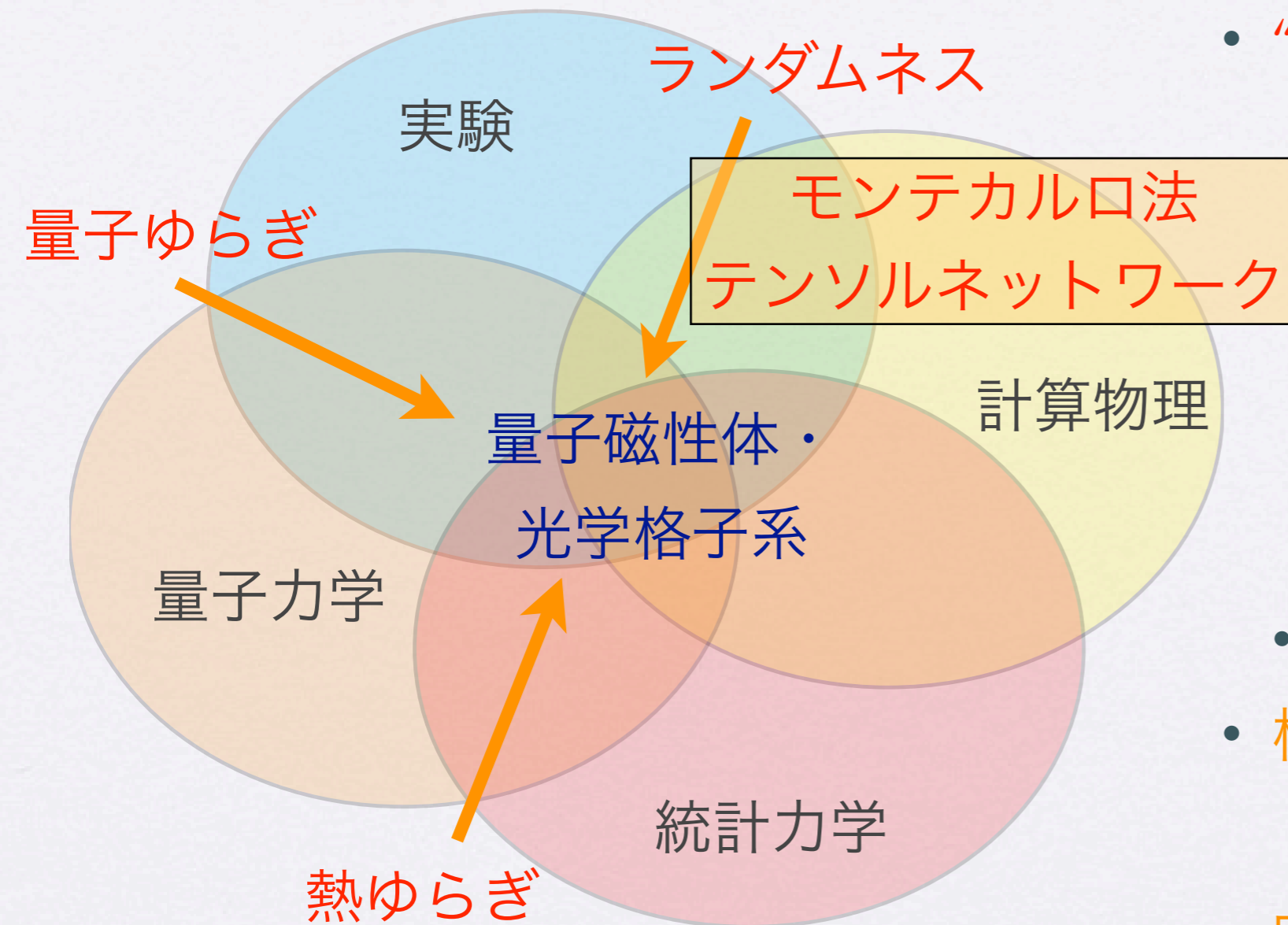


シミュレーションで探る量子多体現象

- 強相関多体系における新奇な状態の探索と相転移・臨界現象の解明
- 量子多体系に対する新たな計算手法開発
- 最先端スパコンの能力を活かすための並列化手法の研究
- 次世代並列シミュレーションのためのオープンソース・ソフトウェアの開発



強相関多体系における新奇な状態の探索

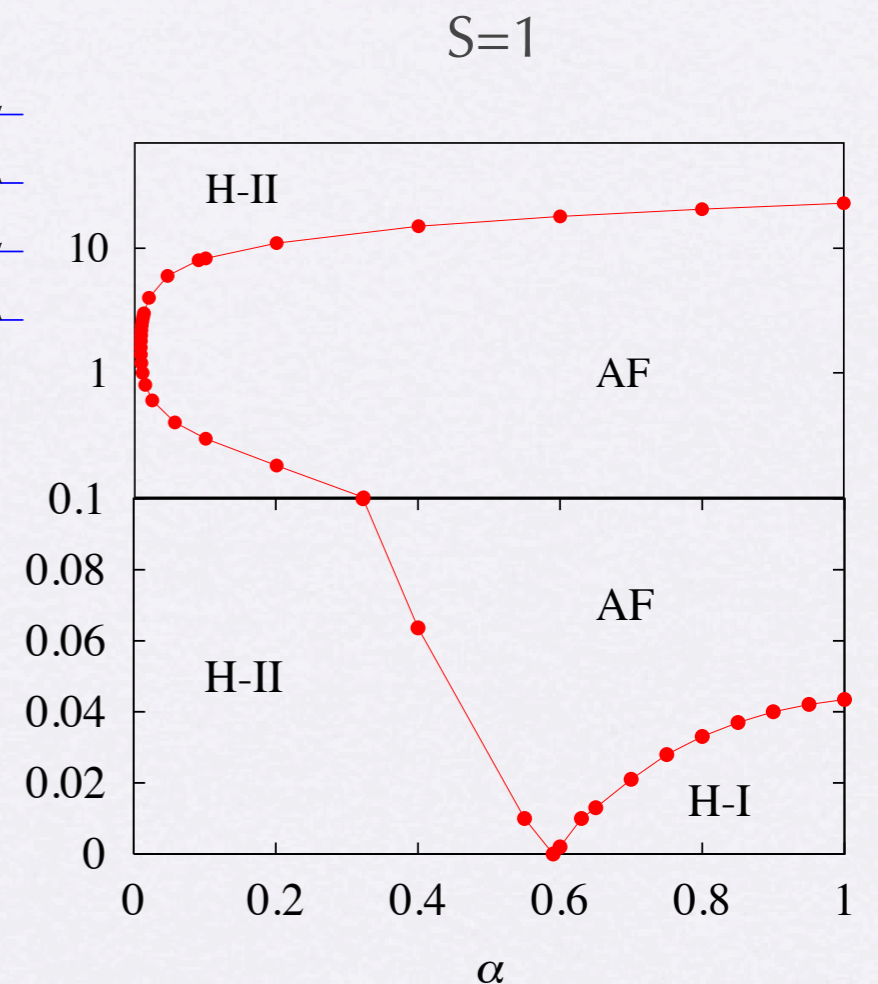
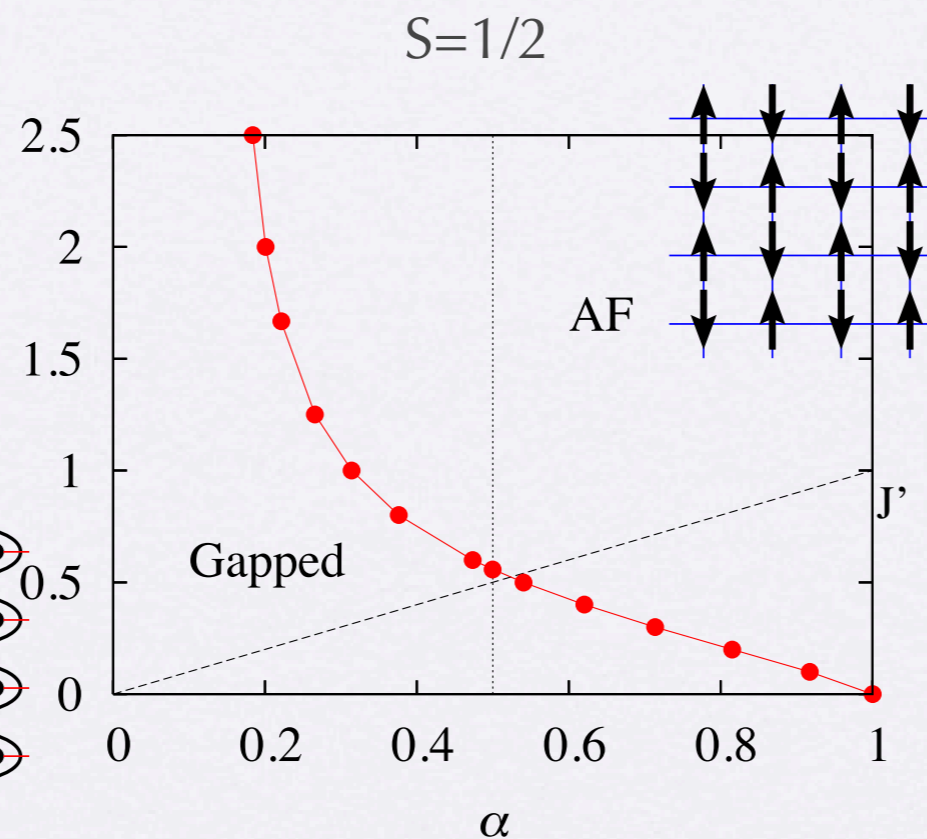
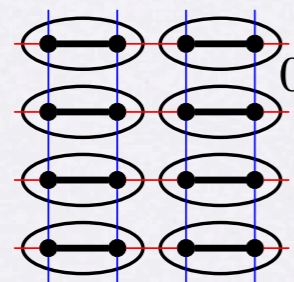
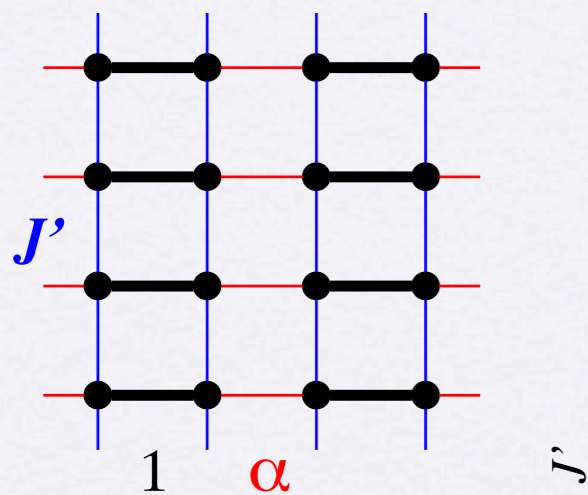


- “形”の効果とランダムネス
- 強い空間的異方性
- 端・表面の効果
量子表面相転移
- 有限サイズ効果
ナノ磁性体
- 長距離相互作用の効果
- 格子のゆらぎ
フォノンとスピンの相互作用
- 空間・時間的非一様性
輸送現象、非平衡状態

Quantum phase transition in 2D HAF

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

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

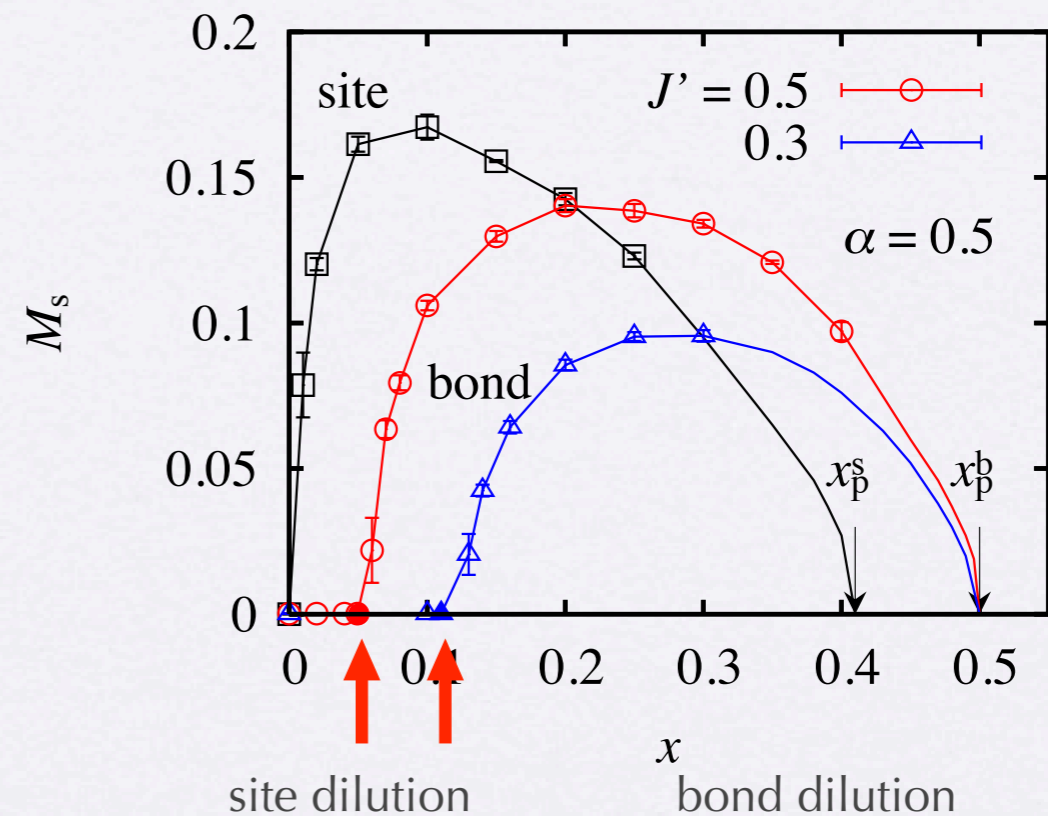
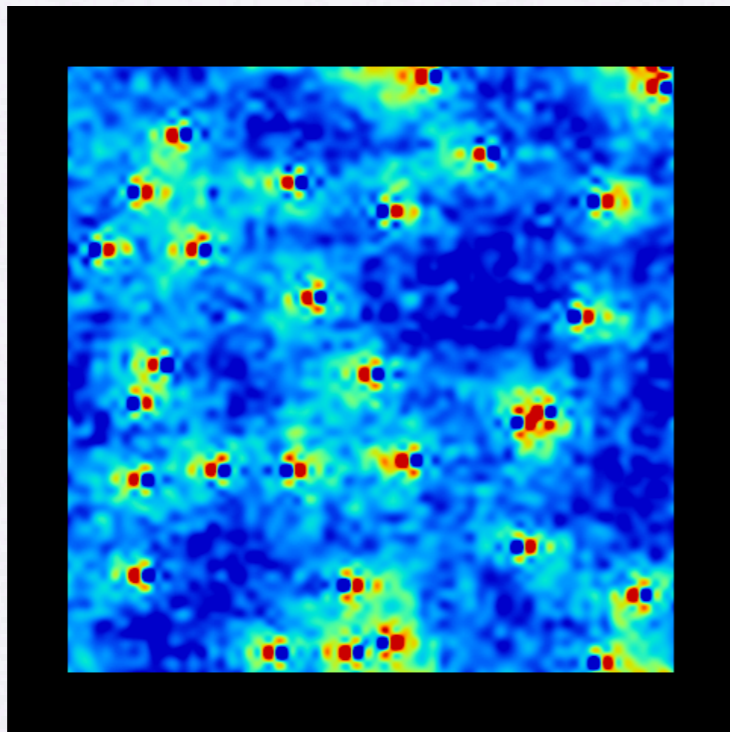


Matsumoto, Todo, et al (2002)

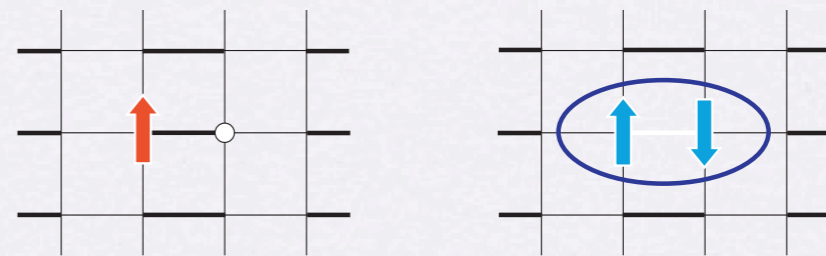
3D Heisenberg (classical $O(3)$) universality

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



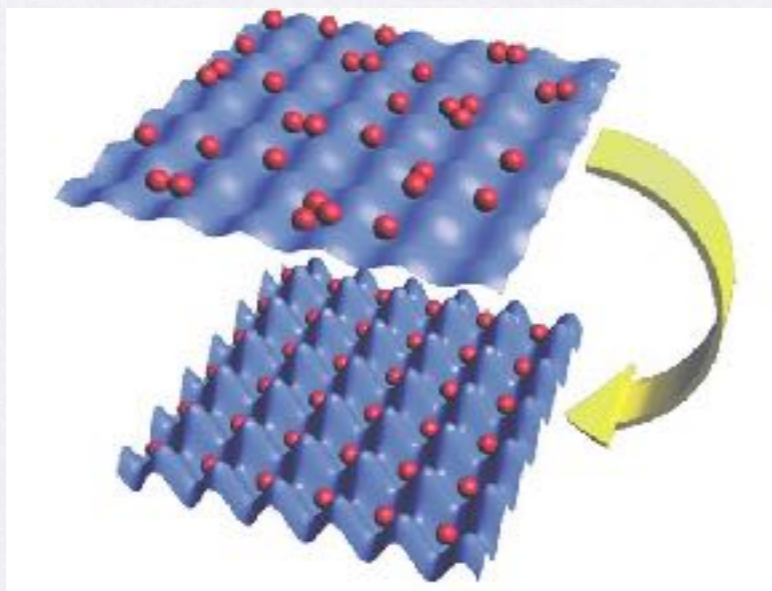
Yasuda, et al (2002), Yasuda et al (2006)

Supersolid in extended Bose-Hubbard model

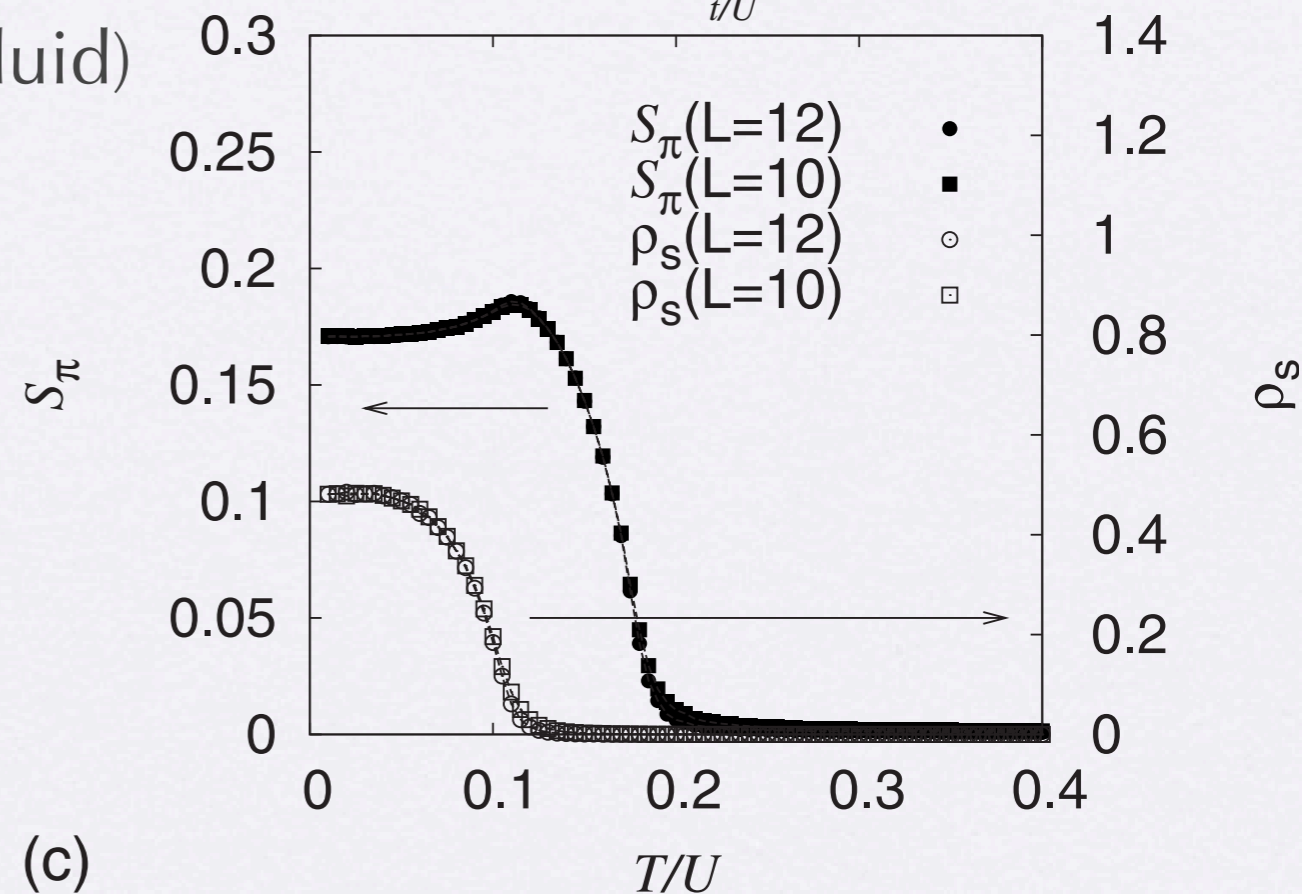
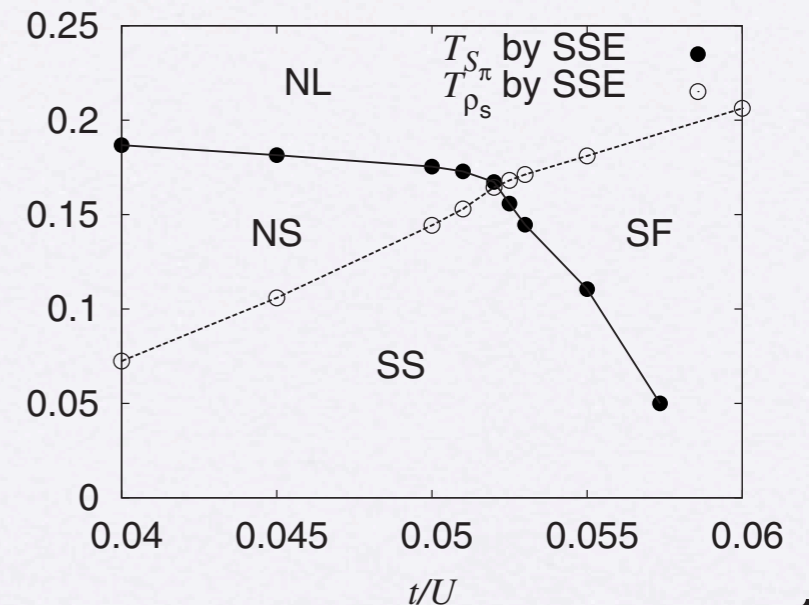
- Interacting soft-core bosons

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

- 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>

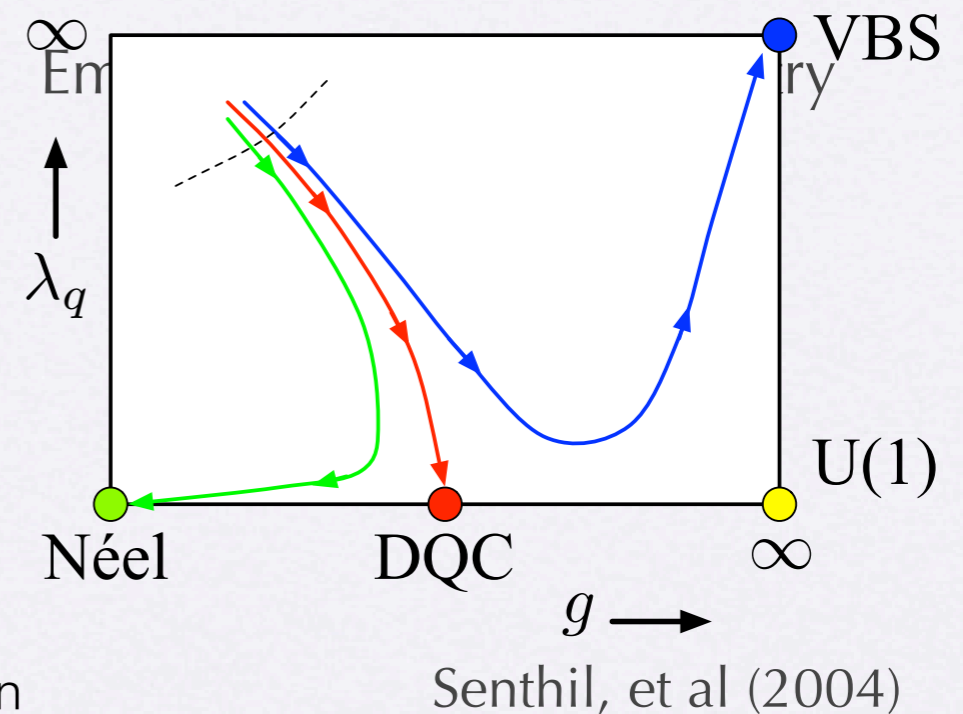
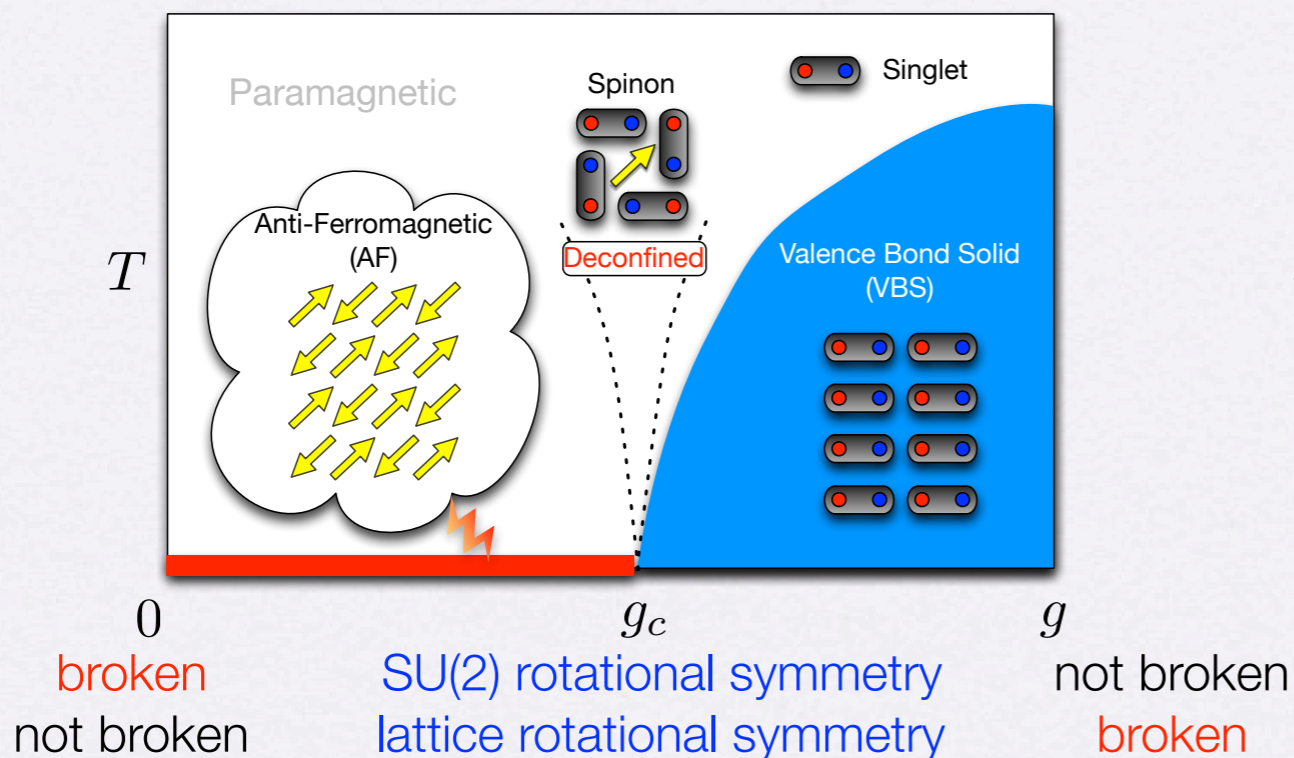


(c)

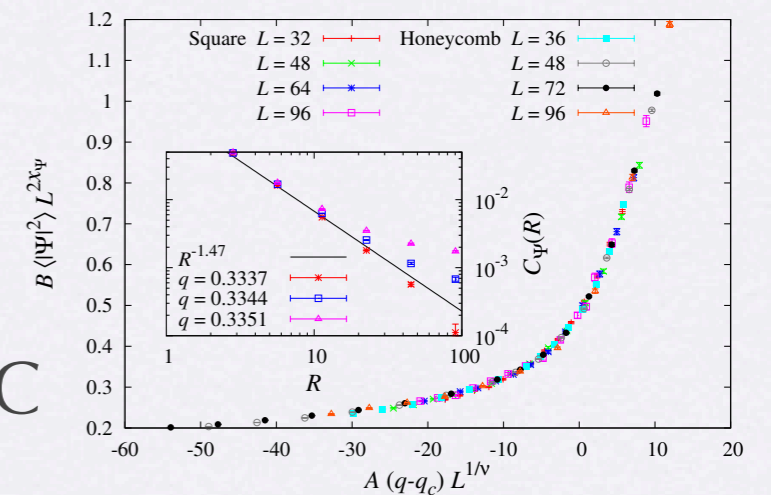
Yamamoto, Todo, Miyashita (2009)

Deconfined critical phenomena

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



- SU(2) symmetric NCCP¹ 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

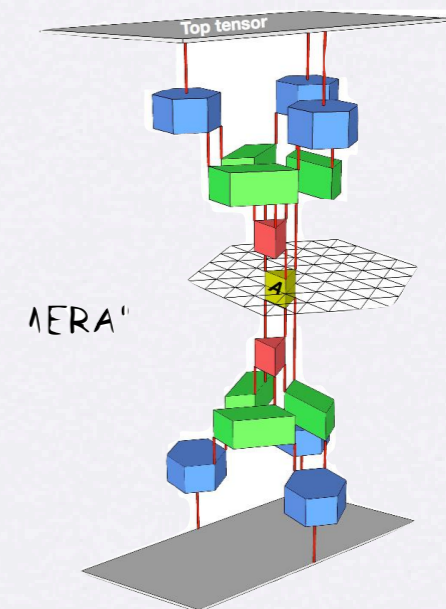


計算物理の階層

- 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

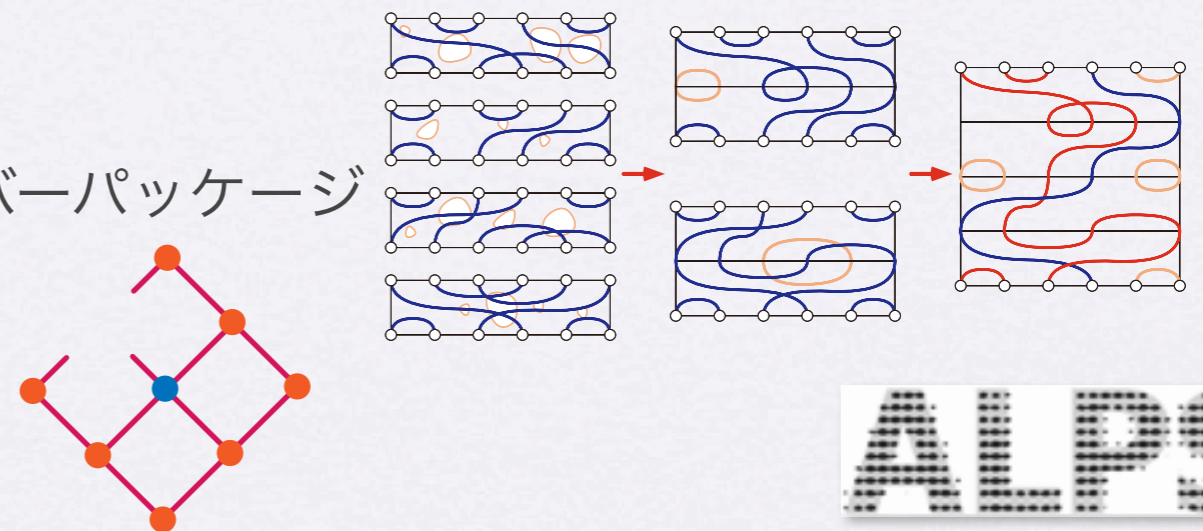
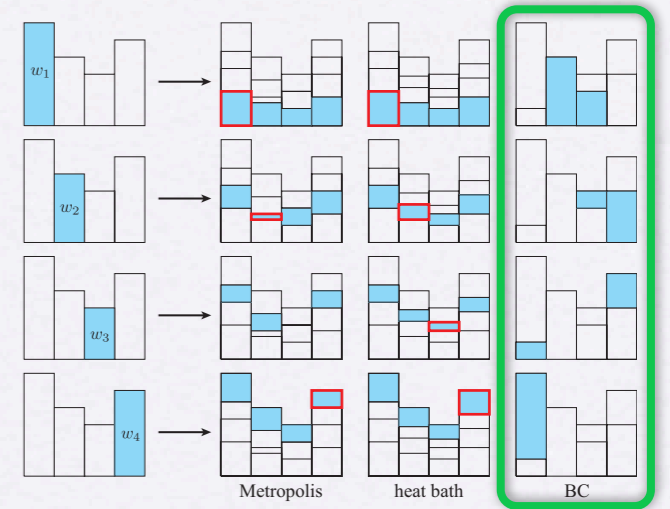
量子多体系に対するシミュレーション手法

- 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困難
- 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



藤堂研で研究・開発しているアルゴリズム とソフトウェアの例

- 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
- 厳密対角化法
 - $H\Phi$: 厳密対角化法による有効模型ソルバーパッケージ
 - [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



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
- 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、負符号問題
- 新しい量子多体シミュレーション手法の開発
 - 量子モンテカルロ法、テンソルネットワーク
- 機械学習における情報圧縮、物質科学シミュレーション・解析への応用
- 新しい最適化手法とその物質科学への応用

これまでの理論演習のテーマ例

- 特異値分解アルゴリズム
 - 乱択特異値分解(Randomized SVD)の実装とその性能検証
- 多体量子力学の基礎原理
 - 閉じた量子系の緩和機構 - ETH (Eigenstate Thermalization Hypothesis)とその数値的検証
 - 熱的量子純粋状態(Thermal Pure Quantum State)による量子統計の基礎付け
- 機械学習・深層学習(Deep Learning)
 - 常微分方程式の解法、数値流体力学、加速器実験結果解析への応用、スピン系の励起スペクトルの推定
 - 制限ボルツマンマシンによる多体量子系の波動関数の解析

2018年度理論演習I,II のテーマ候補

- モンテカルロ法の新手法
 - Self-Learning Monte Carlo法と詳細釣り合いを満たさないモンテカルロ法の組み合わせとフラストレート系への応用
- 固体物理
 - スピン波、対角化、機械学習による励起スペクトルの計算と実験との比較
- 厳密対角化 or モンテカルロ
 - ETHが働かない many-body localization 機構の数値計算
 - 純粋状態における熱力学第二法則の数値検証
- 基礎理論の勉強 + プログラミング(基本となるコードを拡張) + シミュレーション (+ コード公開)