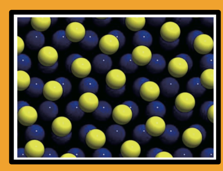
連続空間経路積分モンテカルロ法を用いた数奇量子相の探索

修士1年　鈴木基己

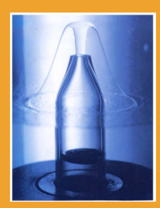
藤堂研究室 TODOGROUP
東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO 大学院理学系研究科物理学専攻 / 物性研究所 DEPARTMENT OF PHYSICS / INSTITUTE FOR SOLID STATE PHYSICS

グラファイト上の^{4}He超固体相

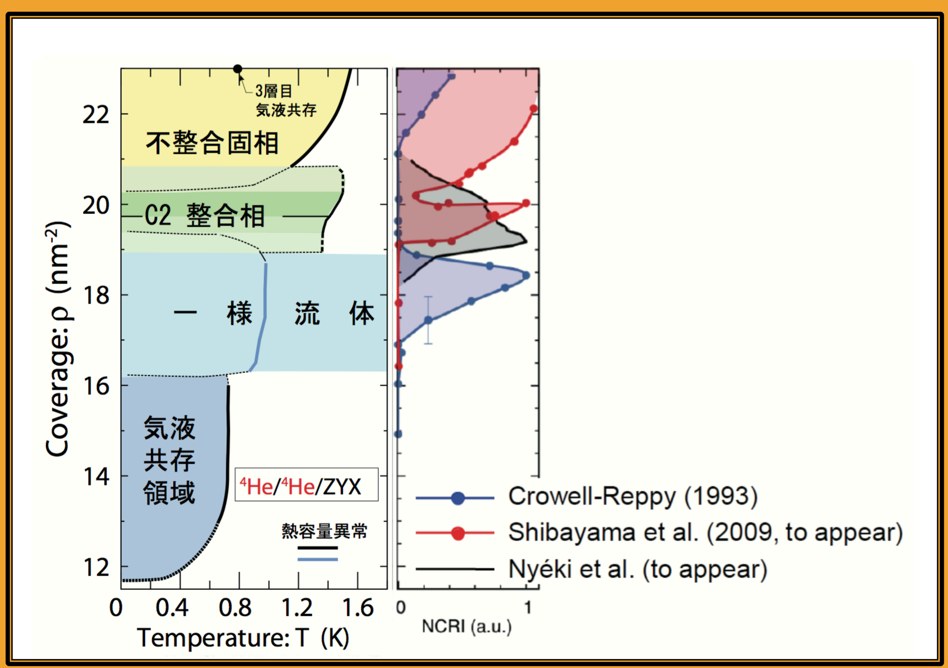
・並進対称性の破れ　→　結晶的秩序

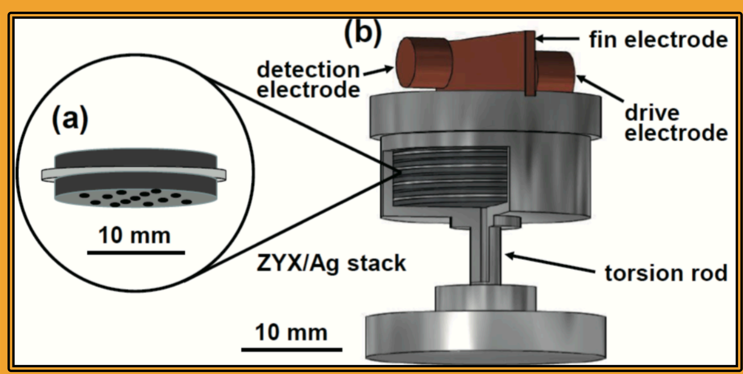


・ゲージ対称性の破れ→　位相秩序(超流動性)



二つの連続対称性を破る相を超固体相と呼ぶ。理論的予測は1969年[2]。
グラファイト上に形成された^{4}He二次元系の第2層に超固体相が存在することが示唆されているものの、現状では実験グループによって結果が異なっている。





ねじれ振り子

最近は別のアプローチによる超固体も発見されている。[3][4]

経路積分モンテカルロ法

周期境界条件を課した長さLの1次元系に同種BosonがN個閉じ込められているシステムを考える。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{\boldsymbol{p}^2}{2}}_{K} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\substack{j,k\\ j\neq k}}^{N} v(x^j, x^k)}_{V}$$

$$\text{Where,}\quad \boldsymbol{p} = (p^1, p^2, \dots, p^N)$$

と書ける。有限(逆)温度βにおける分配関数Zは、

$$Z = \int_0^L \langle \boldsymbol{x}_0 | e^{-\beta\mathcal{H}} | \boldsymbol{x}_0 \rangle \, d\boldsymbol{x}_0$$

$$= \int_0^L \langle \boldsymbol{x}_0 | (e^{-\tau\mathcal{H}})^P | \boldsymbol{x}_0 \rangle \, d\boldsymbol{x}_0$$

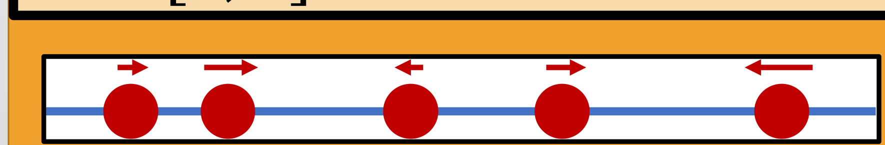
$$= \int_0^L \langle \boldsymbol{x}_0 | e^{-\tau\mathcal{H}} | \boldsymbol{x}_1 \rangle \langle \boldsymbol{x}_1 | e^{-\tau\mathcal{H}} | \boldsymbol{x}_2 \rangle \dots \langle \boldsymbol{x}_{P-1} | e^{-\tau\mathcal{H}} | \boldsymbol{x}_0 \rangle \, d\boldsymbol{x}_0 \, d\boldsymbol{x}_1 \dots d\boldsymbol{x}_{P-1}$$

ここで、各行列要素は

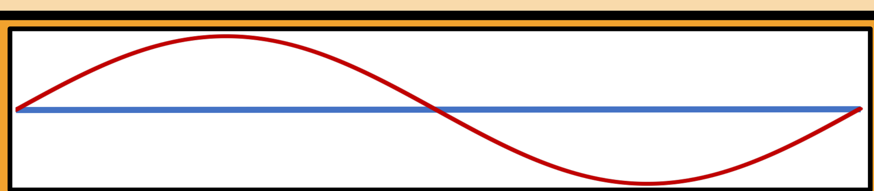
$$\langle \boldsymbol{x} | e^{-\tau\mathcal{H}} | \boldsymbol{x}' \rangle = \langle \boldsymbol{x} | e^{-\tau K} e^{-\tau V} | \boldsymbol{x}' \rangle + O(\tau^2)$$

によって近似的に計算できる。(Suzuki-Trotter分解)

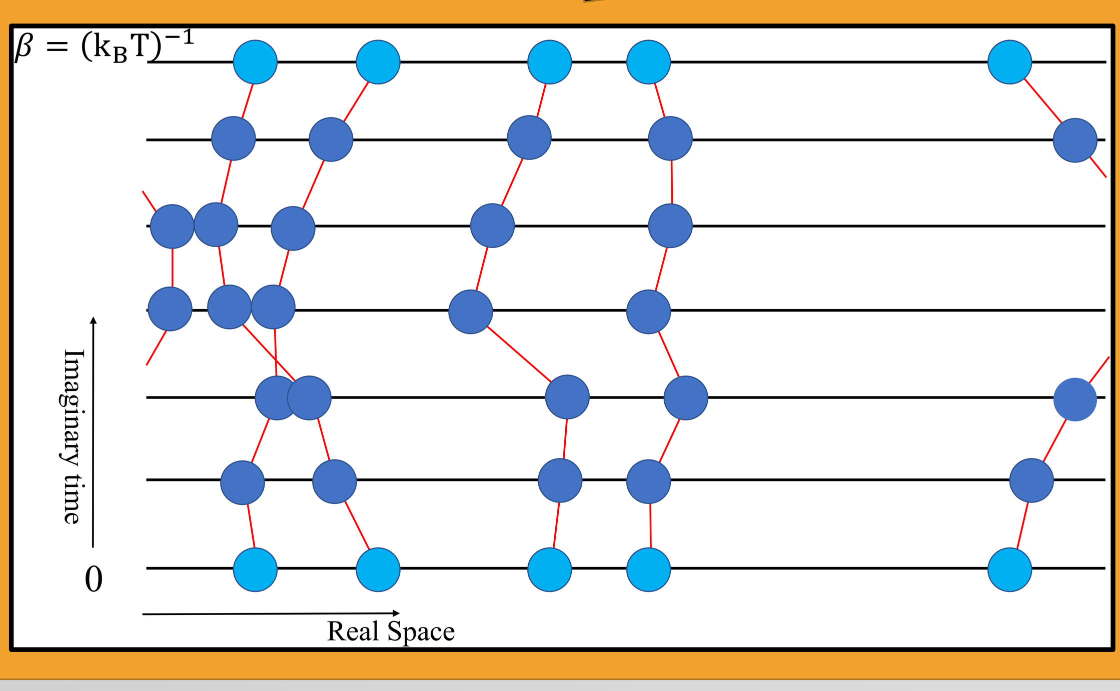
モンテカルロサンプリングの探索を$\boldsymbol{x} \in [0,L]^N$から$X \in [0,L]^{NP}$に拡張して、古典系と同様に計算が行える。



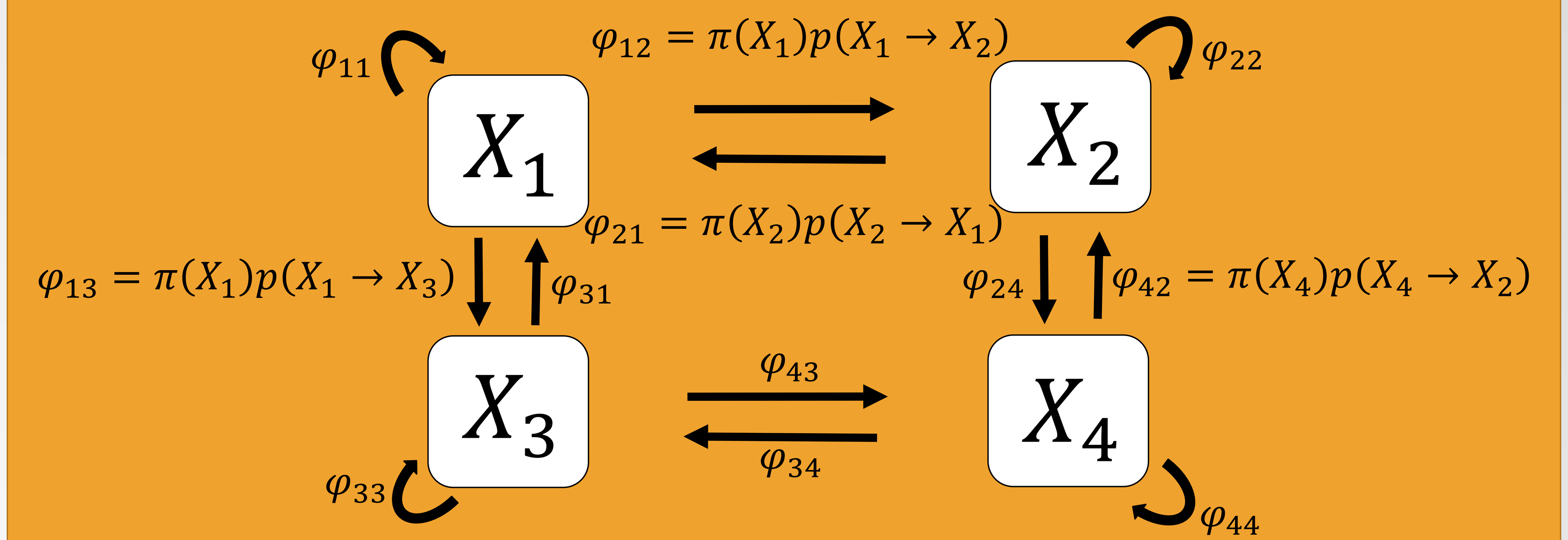
古典系



量子系



マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC) 釣り合いの条件, エルゴード性



$\pi(X) = e^{-\beta E(X)}$　: 状態Xの重み(Given)
$p(X \to X')$　: XからX'への遷移確率(以下を満たす限り任意)
φ_{ij}　: X_iからX_jへのFlux

$$\begin{cases} \sum_j \varphi_{ij} = \sum_j \varphi_{ji} \left(= \pi(X_i)\right) & \text{Global Balance} \\ \exists_{X_i \to \dots \to X_j},\ p(X_i \to \dots \to X_j) > 0 & \text{Ergodic} \end{cases}$$

$\forall_{i,j}\ \varphi_{ij} = \varphi_{ji}$　Detailed Balance Condition
Global Balanceの代わりに詳細釣り合い条件が使われる。

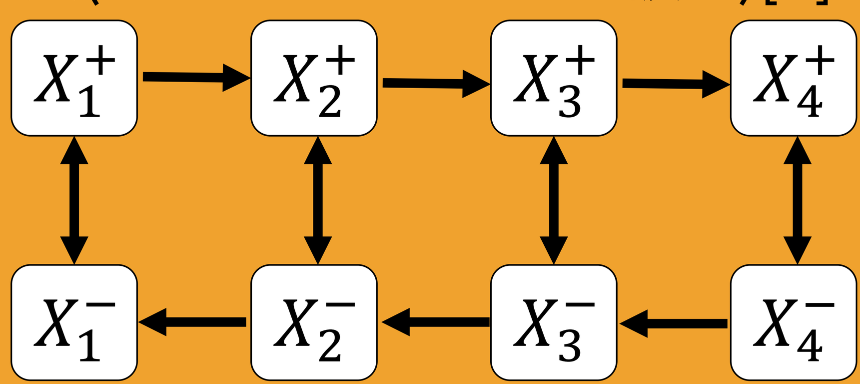
Event-Chain モンテカルロ

・Metropolis法(Detailed Balance)

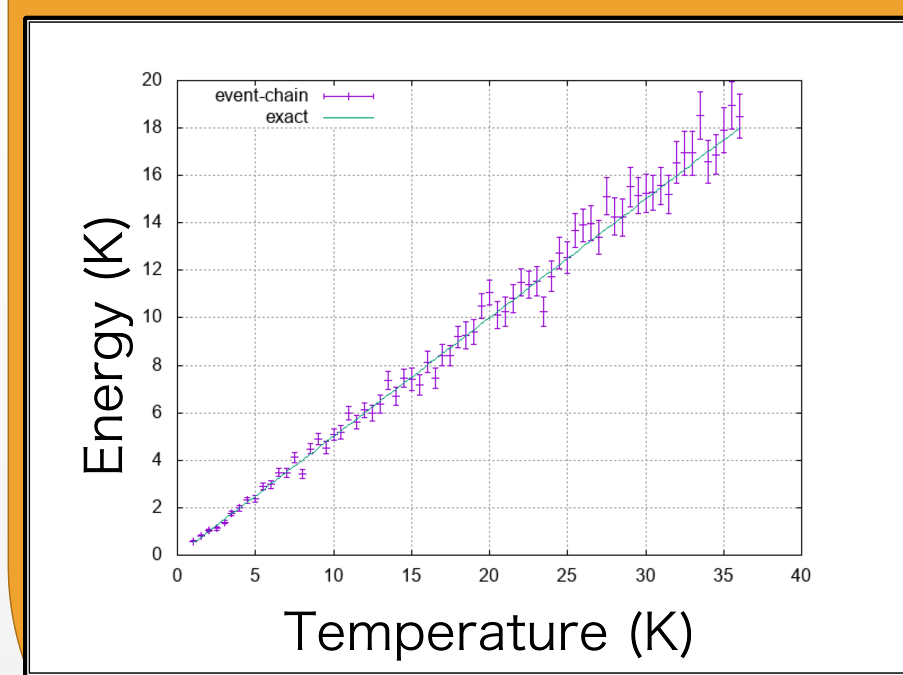
$$p(X \to X') = \min\left(1, \frac{\pi(X')}{\pi(X)}\right) = \min\left(1, e^{-\beta\Delta E}\right)$$

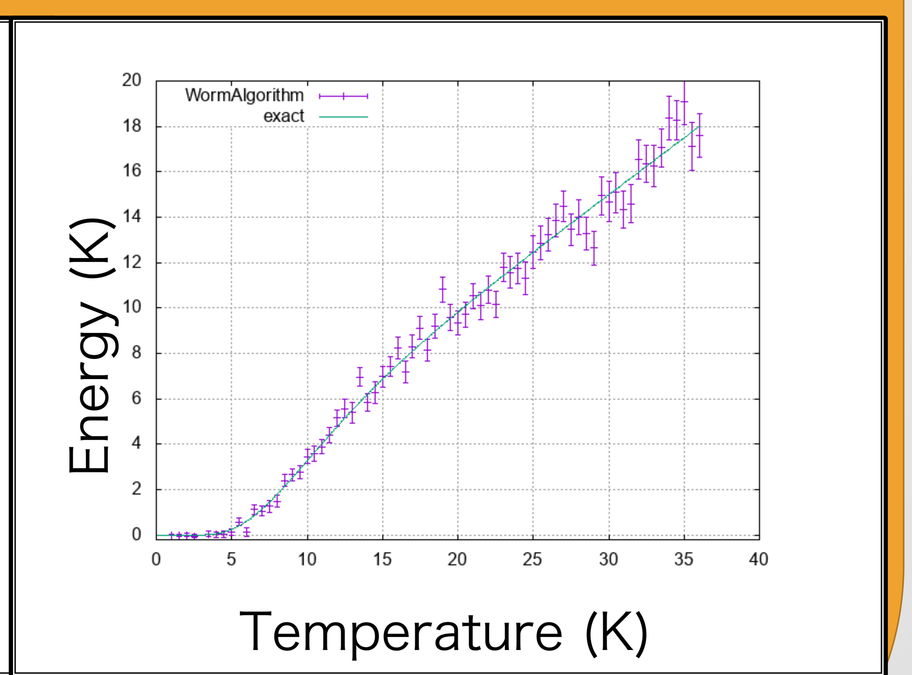
緩和時間が長く計算コストが高い場合がある

・Event-Chain法(Detailed Balanceを破る)[1]



Rejection Free なので緩和が速い





Event-chain
計算時間: 107.4s

Worm Algorithm
計算時間: 404.7s

参考文献

[1] M. Michel, S. C. Kapfer, and W. Krauth, arXiv 1309.7748v2 (2013)
[2] A.F. Andreev and I.M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP **29**, 1107 (1969)
[3] J. Léonard, A. Morales, P. Zupancic, T. Esslinger and T. Donner, Nature, **543**, 67 (2017)
[4] J. Li, J. Lee, W. Huang, S. Burchesky, B. Shteynas, F. Ç. Top, A. O. Jamison, and W. Ketterle, Nature **543**, 91 (2017)