

Random State Technology を用いたトポロジカルスピン結晶の状態密度計算

求研究室 理工工学科 4年 和田島周星

研究背景 [1]

Random State Technology

- ・乱数によってランダムに生成されたベクトルを利用したシミュレーション手法。
 - ・数値シミュレーションにおいて計算負荷を $\mathcal{O}(D^2)$ から $\mathcal{O}(D)$ まで減らすことができる。
(D : ヒルベルト空間の次元)
 - ・物理学への応用例 : 状態密度, 比熱, current-current 相関, 密度-密度相関, 電子スピン共鳴, etc.
 - ・量子情報への応用 : NISQ プロセッサ上での量子超越性の実証として, ランダムな量子回路の出力分布が用いられ, 実証実験の解析にも利用できる。
- 高い計算能力と汎用性を持つ。

Gaussian random state の生成方法

状態 $|\Phi\rangle = \sum_{j=1}^D c_j |j\rangle$ を以下の手順で生成する。

1. 標準なガウス分布から実数の組 (a_j, b_j) を D 組生成し, ベクトル $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_D)$ ($\xi_j = a_j + ib_j$) を指定する。
2. ξ を規格化. $c_j = \frac{\xi_j}{\sqrt{|\xi_1|^2 + \dots + |\xi_D|^2}}$

理論背景

・基本的なアイデアは, $\text{Tr} X$ の正確な近似値が, 純粋状態 $|\Phi\rangle = \sum_{j=1}^D c_j |j\rangle$ を用いて得られること。

$$\text{Tr} X \approx \frac{D \langle \Phi | X | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}$$

Gaussian random state の場合,

$$\mathbb{E} \left[\frac{D \langle \Phi | X | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \right] = \text{Tr} X, \quad \text{rVar} \left[\frac{D \langle \Phi | X | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \right] = \frac{1}{(D+1)} \frac{\overline{\lambda^2} - \bar{\lambda}^2}{\bar{\lambda}^2} \rightarrow 0 \quad (D \rightarrow \infty)$$

・計算負荷について,

$$\langle i | X | i \rangle \quad (i = 1, \dots, D) : \mathcal{O}(D)$$

$$\text{Tr} X = \sum_{i=1}^D \langle i | X | i \rangle : \mathcal{O}(D^2)$$

$D = 2^n$: ヒルベルト空間の次元 (n : 量子ビット数)
左の近似により $\mathcal{O}(D^2)$ の計算は $\mathcal{O}(D)$ に置き換わる。

応用 : 状態密度

状態密度は, gaussian random state $|\Phi\rangle$ を用いて,

$$\text{DOS}(k\pi/T) = \frac{T}{2\pi N} \text{DFT}[\langle \Phi | e^{-i\tau H} | \Phi \rangle]$$

($k = -N, \dots, N-1$, $\tau = T/N$: 時間ステップ)

ナイキストのサンプリング定理から $\tau < \pi / \|H\|$

1 粒子系のハミルトニアンは,

$$H = \sum_{\langle m,n \rangle} v_{mn} (a_m^\dagger a_n + \text{h.c.}) + \sum_m w_m a_m^\dagger a_m$$

数値計算の手順

1. Gaussian random state $|\Psi(0)\rangle = \sum_m c_m a_m^\dagger |0\rangle$ を生成。
2. $i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$ を離散的に解く。
3. 離散時間フーリエ変換を実行。

研究目的

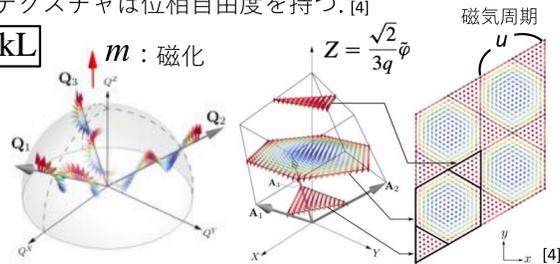
- ・ Random state technology を用いたシミュレーションにより, スキルミオン格子 (SKL), ヘッジホッグ格子 (HL) の DOS を得る。
- ・ 位相, 磁化をパラメータとしてスピン構造の変調を行うことで DOS がどのように変化するかを明らかにする。

モデル

トポロジカルスピン結晶の構成

- ・複数のスピン密度波の重ね合わせによって, トポロジカルなスピネクスタチアを設計する。[2]
- ・「結晶の次元数 < 重ね合わせの波の数」の場合を考える。このとき, 位相シフトを空間移動に還元できないため, スピネクスタチアは位相自由度を持つ。[4]

3Q-SkL

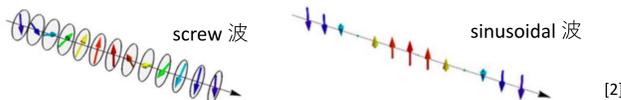


- ・ 3次元空間で3つの波を重ね合わせる。
- ・ XY 平面に平行な面を切り取り, SkL を得る。
- ・ Z の値によって, 位相 $\tilde{\varphi}$ を変化させる。
- ・ z 軸に沿った一様磁化 m を変化させる。

4Q-HL

- ・ 4次元空間で4つの波を重ね合わせる。
- ・ XYZ 空間に平行な空間を切り取り, HL を得る。
- ・ W の値によって, 位相 $\tilde{\varphi}$ を変化させる。
- ・ z 軸に沿った一様磁化 m を変化させる。

・ screw 波の場合と sinusoidal 波の場合でそれぞれ計算を行う。



ハミルトニアン [3]

フント結合によって背景のスピネクスタチア \mathbf{n}_i と結合した自由電子系について, 二重交換モデルから,

$$H = \sum_{ij} t^{ij} c_i^\dagger c_j - J \sum_i \mathbf{n}_i c_i^\dagger \sigma c_i$$

$$\mathbf{n} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)$$

$c_i^\dagger (c_i)$: スピン 2 成分の生成 (消滅) 演算子

強結合極限 $J \gg t^{ij}$ の場合を考える。

この時, ホッピング電子のスピンはスピネクスタチアに平行に並ぶように強制される。ハミルトニアンの結合項を対角化することで, スピン方向が常に上になるようにする。

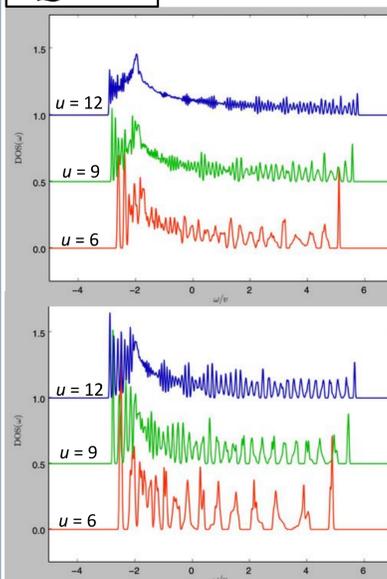
$$H = \sum_{ij} t_{\text{eff}}^{ij} d_i^\dagger d_j \quad (\pm J)$$

$$t_{\text{eff}}^{ij} = \cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} + \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} e^{-i(\phi_i - \phi_j)}$$

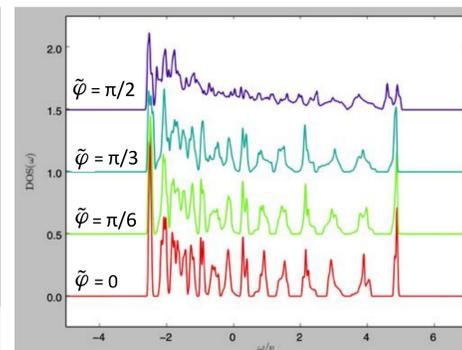
$d_i^\dagger (d_i)$: スピンレス生成 (消滅) 演算子

結果

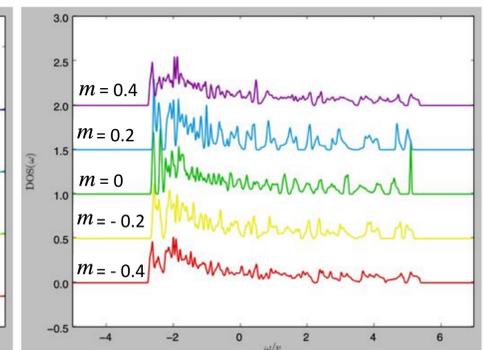
3Q-SkL



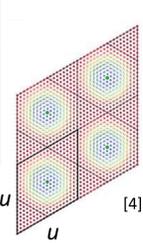
磁気周期 (u) 依存性 ($u = 6, 9, 12$)
(上) screw 波, (下) sinusoidal 波
 $m = 0, \tilde{\varphi} = 0$



位相依存性 ($\tilde{\varphi} = 0, \pi/6, \pi/3, \pi/2$)
sinusoidal 波, 磁気周期 6, $m = 0$

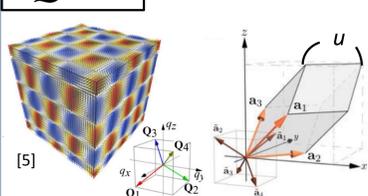


磁化依存性 ($m = -0.4, -0.2, 0, 0.2, 0.4$)
sinusoidal 波, 磁気周期 6, $\tilde{\varphi} = 0$

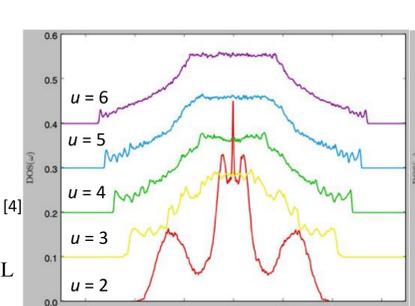


- ・ 磁気周期を大きくするとバンドが広がり, 通常の三角格子の DOS に近づいている。
- ・ 一様磁化をもたない sinusoidal 波の重ね合わせでは, バンドが縮退し, 高エネルギー帯でバンドギャップを持つ。一方, screw 波にはこの特徴は見られない。
- ・ 位相を 0 から $\pi/2$ に近づけるにつれ, このバンドギャップが小さくなり, $\pi/2$ で消失する。ピークの位置は一定。
- ・ 磁化を持つ場合, 縮退は解け, バンドが広がる。

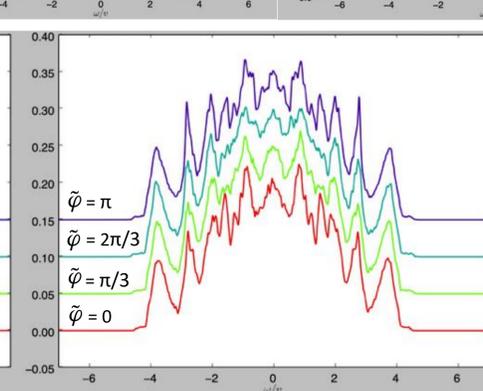
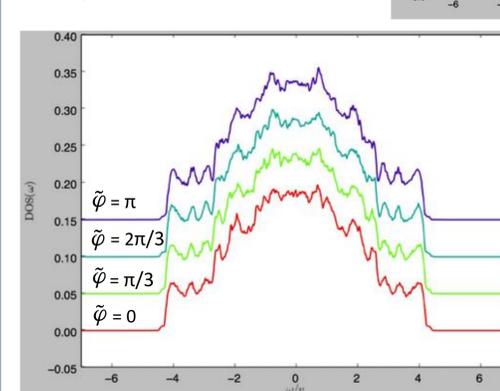
4Q-HL



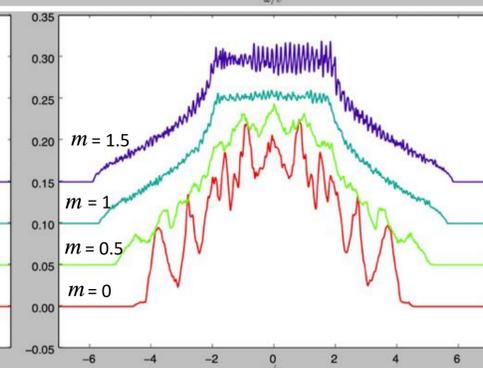
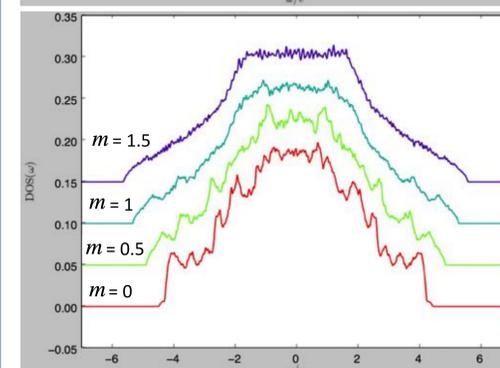
(左) screw 波の重ね合わせによる 4Q-HL
(右) 4Q-HL における単位胞



磁気周期 (u) 依存性 ($u = 2, 3, 4, 5, 6$)
(左) screw 波, (右) sinusoidal 波
 $m = 0, \tilde{\varphi} = 0$
磁気周期が大きくなるにつれ広がり, 通常の立方格子の DOS に近づいている。



位相依存性 ($\tilde{\varphi} = 0, \pi/3, 2\pi/3, \pi$)
(左) screw 波, (右) sinusoidal 波
磁気周期 3, $m = 0$.
screw 波, sinusoidal 波 いずれも, 位相に対する大きな変化は見られない。
3Q-SkL のときと同様, screw 波の場合に比べ sinusoidal 波ではピークが明瞭である。



磁化依存性 ($m = 0, 0.5, 1.0, 1.5$)
(左) screw 波, (右) sinusoidal 波
磁気周期 3, $\tilde{\varphi} = 0$.
3Q-SkL のときと同様, screw 波, sinusoidal 波 のどちらも磁化を大きくするにつれ通常の立方格子の DOS に近づいている。

まとめ

Random state technology がスピンモアレを持つ大きい系における状態密度計算において有用であることがわかった。3Q-SkL, 4Q-HL における状態密度と, その位相・一様磁化に対する変化を得ることができ, いずれも磁気周期を大きくした場合にトポロジカルな性質は状態密度に現れず, それぞれ三角格子, 単純立方格子の状態密度に収束することがわかった。また, 3Q-SkL の位相に対する変化では, トポロジカルな性質がバンドギャップに現れる結果となった。

参考文献

- [1] F. Jin et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 012001 (2021)
 - [2] S. Hayami and Y. Motome, *J. Phys.: Conde. Matter* **33**, 443001 (2021)
 - [3] K. Hamamoto, M. Ezawa, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **92**, 115417 (2016)
 - [4] K. Shimizu et al., *Phys. Rev. B* **105**, 224405 (2022)
 - [5] K. Shimizu et al., *Phys. Rev. B* **103**, 054427 (2021)
- 計算コード Web [https://jugit.fz-juelich.de/qjp/random-state-technology] (2020).