

氏名	かど 門 脇 協 しん 眞 じ 示
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	論 工 博 第 2469 号
学位授与の日付	平 成 3 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 2 項 該 当
学位論文題目	量 子 ス ピ ン 系 の 高 温 展 開 に よ る 新 し い モ ン テ カ ル ロ 法 の 研 究

論文調査委員 (主 査) 教授 上田 顯 教授 茨木俊秀 教授 鶴井 明

### 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は量子スピン系の高温展開法における展開係数をモンテカルロ (MC) 法と内挿法を併用して計算し、直接分配関数を求めて熱力学的諸量を導く方法を開発して、スピン 1/2 のハイゼンベルクモデルおよび XY モデルに応用した結果をまとめたもので、序論、まとめを含めた 8 章と 1 付録より成る。

第 1 章序論では、高温展開法について、著者の研究と関係するモーメント法を中心に、理論の枠組と従来の重みつき MC 法の概要を述べたのち、本研究の目的と 2 章以下の内容を概説している。

第 2 章では高温級数展開としてモーメント展開法を詳述している。 $r$  番目の展開係数は一般に最近接ボンドの総数  $N_b$  の  $r$  乗個の和で表され、1 つの項はスピン演算子の積のトレースで与えられる。本研究の MC 法では  $N_b$  個の項の中からランダムに項を抽出し、そのトレースの平均として展開係数を評価する。ハイゼンベルクモデルでは、スピン演算子の積は互換の積で表され、この積は位数  $N$  (スピンの総数) の置換となり、置換はさらに独立な巡回置換に分解される。求めるトレースは巡回置換のサイクルの長さ個数によって表現されることを述べ、熱力学量を求める公式をまとめている。XY モデルでは、1 つの項に含まれるスピン演算子の積はいくつかのクラスターより成る有向グラフに対応させることができ、求めるトレースは各クラスターのトレースの積で与えられるが、圧倒的多数のグラフはゼロトレースとなる。非ゼロ値を与えるグラフの条件の詳述して、そのトレース値および熱力学量を求める公式をまとめている。

第 3 章ではハイゼンベルクモデルの展開係数の MC 評価法を述べている。すなわち、互換の積を独立な巡回置換の積に分解し、各巡回置換のサイクルの長さ個数からトレースを求め展開係数を評価する高速アルゴリズムについて述べ、そのプログラムの主要部分を付している。

第 4 章では、XY モデルの MC 評価法を述べている。まずトレース値が非ゼロとなる独立な無向クラスターの抽出法について、ついで任意の独立なクラスターのトレースが非ゼロとなる割合の算定法、最後に独立なクラスター毎に評価したトレース値からもとの項全体のトレース値を求める計算法を、具体例を用いて詳述している。前 2 章の方法で、それぞれのモデルについて約 10 個の展開係数を MC 法で評価しておけば、残りの係数はこれを用いて内挿法によって求められる。こうして得られる展開係数を用いて望

む温度での分配関数の近似値が級数和で与えられる。

第5章では、内挿公式に有理関数が有効なこと、それに含まれる未知係数を定めるためにMC法で求める約10個の展開係数の選び方について考慮すべき経験事項を両モデルについて述べている。ついで、数千項、数万項の級数和の計算を低温領域についても可能にするために開発した $-2^{31} \sim +2^{31}$ の範囲のベキ指数をもつ10進浮動小数点数の四則演算プログラムについて述べ、付録にそのプログラムを載せている。

第6章では、ハイゼンベルクモデルの1次元系と2次元系への応用結果を述べている。1次元系ではスピサイズ $N=10$ の場合を厳密な数値解と比較して、エントロピー、内部エネルギー、比熱、帯磁率が低温まで高精度で得られることを示し、ついで $N=20, 30, 128$ の系に対して従来の結果と比較している。2次元系では $N=10 \times 10, 20 \times 20, 30 \times 30$ の正方格子に対して熱力学的諸量を評価し、低温側あるいは高温側でよい結果を与える他の方法の結果と比較検討し、著者の方法の有効性を示している。

第7章では $N=32, 128$ の1次元XYモデルへの応用結果を述べている。高温展開の級数和に取り込む項数と熱力学的諸量の信頼できる温度範囲との関係を調べ、かつ桂の厳密解と比較して、本方法が1次元XYモデルにも有効であることを示している。

第8章では、まとめと今後の指針を簡単に述べている。

### 論文審査の結果の要旨

量子スピン系の熱平衡状態の性質の計算物理学的研究にはモンテカルロ(MC)法を応用した高温展開法、経路積分法に基づく方法、分解セル法が提案されているが、それぞれ一長一短であって十分低温まで信頼できる結果を導くには至っていない。本論文は従来の高温展開法とは異なり、展開係数をMC法と内挿法を併用して評価し、数千、数万項の級数和として直接分配関数を求めるという著者が提案した方法を、有限のスピン $1/2$ のハイゼンベルクモデル系、XYモデル系へ応用した結果をまとめたもので、主な成果は次の通りである。

1. グラフ理論に基づく厳密な展開係数の評価法でははじめの20項程度が評価されているにすぎないが、著者の方法によるとはるかに高次の係数まで求めることができる。すなわち、MC法で10個程度の係数を評価し、他は有理関数によって内挿すれば、数千、数万のベキ指数の展開係数までよい精度で求められることを示した。

2. 数千、数万項の級数和計算のために、ベキ指数 $-2^{31}$ と $+2^{31}$ の間の10進浮動小数点数の四則演算プログラムを開発し、従来の方法よりさらに低温領域での熱力学量の評価を可能にした。

3. ハイゼンベルクモデルについては、展開係数に現れる $N$ (スピンの個数)位の置換を独立な巡回置換へ分解する高速アルゴリズムを開発し、MC法による高次の展開係数の評価を容易にした。1次元XYモデルについては、非ゼロのトレースをもつ項のMC法による抽出率を増加する方法を導入し、計算機による展開係数の評価が実行可能となる程度にまで容易にした。

4. 1次元、2次元ハイゼンベルクモデルおよび1次元XYモデルの熱力学的諸量を、他の方法と比較してより低い温度領域までよい精度で求めている。

以上の成果により、本論文は学術上、応用上寄与するところがすくなくなく、工学博士の学位論文とし

て価値あるものと認める。

また、平成3年1月25日、論文内容とそれに関連した試問を行った結果、合格と認めた。