

氏 名	原 田 健 自
学位(専攻分野)	博 士 (工 学)
学位記番号	工 博 第 1754 号
学位授与の日付	平成 10 年 5 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当
研究科・専攻	工学研究科応用システム科学専攻
学位論文題目	Numerical Study of Quantum Spin Models by Loop Algorithm (ループアルゴリズムを用いた量子スピン系の数値的研究) (主査)
論文調査委員	教授 宗像豊哲 教授 船越満明 教授 野木達夫

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は物理系の量子的性質を調べるシミュレーション方法としての量子モンテカルロ法に関するものであり、新しい手法であるループアルゴリズムの基礎研究と応用研究を行ったものであり、3章からなっている。

第1章はまず量子モンテカルロ法を実現するための伝統的方法を導入し、それが持つ問題点を整理している。量子系では演算子の非可換性を回避するために逆温度を表す次元(トロッタ次元)を加えて古典系で扱うアプローチをとり、ワールドライン(トロッタ方向にアップスピンを連ねてできるもの)を局所的に更新する方法が標準的である。これは丁度古典系におけるメトロポリス法に匹敵する。しかしこの方法では相転移点で緩和時間が非常に大きくなり、シミュレーションでの相関時間も大きくなり計算が困難となる。同じく絶対零度近くでは量子揺らぎが局所更新では扱いにくくなり緩和時間も発散する。これらの難点を克服するためにEvertzらが古典系のクラスターアルゴリズムを発展させグローバルなループを更新するループアルゴリズムを提案した(1993)。さらにBeardとWieseはトロッタ方向の離散化をしない連続版ループアルゴリズムを提案した(1996)ところである。本章ではループアルゴリズムを系統的に導入し、計算結果を評価するために統計的誤差が小さくなるimproved estimatorについて論じている。

第2章は、応用研究として平面的特性の磁性体や $\text{He}^4$ 超流動体などに用いられる2次元 $S=1/2$ 量子XYモデルにおけるKosterlitz-Thouless (KT) 相転移の検証を目標に、ループアルゴリズムを用いてヘリシティモジュラスを評価している。数値的実験によってKT理論の検証を行う大規模計算としてDingとMakvicのものがよく知られているが、相関距離と平面内帯磁率をもとにしてKT型とした。これには疑問の余地があった。KT相転移の相関距離が指数関数的発散を示すのに対して通常の相転移がべき乗発散であるが、これらを区別するのは技術的に難しいからである。本章では転移点でユニバーサルジャンプなどの特徴ある振る舞いをするヘリシティモジュラスを測ることとしている。ヘリシティモジュラスはワールドラインのワインディング数の二乗平均で求められる。それはワールドラインアルゴリズムでは保存量になっていて変化のないものであるのに対してループアルゴリズムでは変化もあり直接測定できることが明かにされた。一方ヘリシティモジュラスはKosterlitzの繰り込み群方程式の繰り込まれる結合定数であるとみなせるので、この方程式から新たなスケールン式(通常の数値実験で用いるものとは異なっている)を導出し解析に用いている。実験結果はこのスケールン式によく合い、スケールン関数の臨界点上の値もKT理論と一致することを確かめることで、2次元量子XYモデルがKT相転移を起こしているという結論を与えている。

第3章はもう一つの応用研究として、高温超伝導物質の基体となる $\text{La}_2\text{NiO}_4$ の理論モデルである2次元 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルを扱っている。中性子散乱の実験と理論の予想外の不一致について議論になっているところであった。理論上は大きなスピン値をもつものほどよい近似をもたらす筈であるのに $S=1/2$ の場合に比べてよくなかったという事情があった。これに決着をつけるためにトロッタ次元方向の離散化を行わない連続版ループアルゴリズムを用いたシミュレーションを行ったものである。従来のアルゴリズムよりも簡単に実現できることと効率の点でもすぐれていることを実証して

いる。シミュレーションの結果は中性子散乱実験とよく一致し、その実験温度あたりでは相関距離の理論予想式が有効でないことを明かにしている。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は物理系の量子的性質を調べるシミュレーション方法としての量子モンテカルロ法に関して、伝統的アルゴリズムの問題点を整理し、それらを克服するループアルゴリズムの系統的導出を行い、それを用いて2次元量子XYモデルに対するKosterlitz-Thouless相転移、および2次元 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルの研究を行ったものであり、得られた主な成果はつぎの通りである。

1. クラスタモンテカルロアルゴリズムの計算結果を評価する新たなimproved estimatorを提案し、統計的誤差が通常のestimatorより小さくなることを証明した。

2. 連続時間上のループアルゴリズムを用いて2次元 $S=1/2$ 量子XYモデルのヘリシティモジュラスを直接的に計算し、Kosterlitzの繰り込み群方程式（実は繰り込まれる結合定数がヘリシティモジュラスに相当）から新しく導いたスケールリング式に非常によく合うこと及びスケール関数の臨界点上での値がKT理論と一致することを示し、2次元 $S=1/2$ 量子XYモデルがKT相転移を起こしているという結論を導いた。

3. 2次元 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルに対して簡明な実現を許す連続時間上のループアルゴリズムを構成し、それを用いて相関距離などを計算した結果は $\text{La}_2\text{NiO}_4$ の中性子散乱実験とよく一致し、実験温度域での理論予想式が有効でないことを明かにした。

以上の通り、量子スピン系のシミュレーション研究で有望なループアルゴリズムの基礎を固めるとともに、本格的な応用を実現させたことは、局所的更新法を凌駕するグローバルアルゴリズムの可能性を上げ、量子的な物性を明かにする手段を確かなものにした点で学術上、実際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成10年4月20日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。