

## 量子系の Monte Carlo 法の研究

東大理 鈴木増雄, 黒田 昭, 宮下精二

## § 1. 概 論

Monte Carlo 法, 特に平衡状態の Monte Carlo 法は諸量  $X$  の ensemble average ,

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | X e^{-\beta \mathcal{H}} | \alpha \rangle}{\sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | e^{-\beta \mathcal{H}} | \alpha \rangle} \quad (1)$$

(ここで  $\mathcal{H}$  は系のハミルトニアン,  $|\alpha\rangle$  は系の 1 状態,  $\beta = 1/kT$ )  
 , の  $|\alpha\rangle$  についての和が実行困難の時, 状態  $|\alpha\rangle$  を  $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$  に比例する確率でとりだし, それによって,

$$\langle X \rangle_{\text{M.C.}} = \sum_{|\alpha\rangle_{\text{M.C.}}} \langle \alpha' | X | \alpha' \rangle \quad (\text{Monte Carlo steps}) \quad (2)$$

(ここで  $\langle \rangle_{\text{M.C.}}$  は Monte Carlo 法による ensemble average,  $|\alpha\rangle_{\text{M.C.}}$  は Monte Carlo の 1 configuration )

として求めるものである。

状態  $|\alpha\rangle$  を  $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$  に比例する確率でとり出す方法として, kinetic model のように状態を  $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$  に従って step させ,  $|\alpha\rangle$  が  $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$  に従って分布しているような ensemble , つまり平衡状態を作りだし, そこでの平均をとる方法が普通行なわれている。<sup>1)2)</sup>

しかし, すべてが対角化されている古典系では,  $\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle = E_\alpha$ ,  $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle = e^{-\beta E_\alpha}$  であるのに対し, 量子系では,  $\mathcal{H}$  の固有状態でない  $|\alpha\rangle$  について  $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$  が一般には計算不可能なため Monte Carlo 法は困難であると考えられ, 現在まで実行されていない。そこで量子系での Monte Carlo 法について一つの方法を提案する。

## § 2. 量子系の Monte Carlo 法

これを近似的に可能にする方法として,  $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$  を求めるのに鈴木<sup>3)</sup>に

よって提案された Trotter's formula による  $\exp(-\beta\mathcal{H})$  の近似的評価法を用いる。

これはハミルトニアンが十分 short range interaction からなっているとき short range のハミルトニアンを  $\mathcal{H}_i$  とし

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^p \mathcal{H}_i \quad (3)$$

とする。Trotter's formula を用いて

$$\exp\{-\beta(\mathcal{H}_1 + \dots + \mathcal{H}_p)\} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \prod_{i=1}^p \exp\left(\frac{1}{n} \mathcal{H}_i\right) \right]^n \quad (4)$$

と書ける。

ここで  $n$  を有限  $n_0$  で止めたものを  $n = n_0$  の近似として

$$\begin{aligned} & \langle \alpha | \exp(-\beta\mathcal{H}) | \alpha \rangle_{n=n_0} \\ &= \underbrace{\langle \alpha | \exp\left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_1\right) \dots \exp\left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_p\right) \dots}_{1st} \underbrace{\exp\left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_1\right) \dots \exp\left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_p\right) | \alpha \rangle}_{n_0th} \end{aligned} \quad (5)$$

と評価することができる。

今,  $\mathcal{H}_i$  は十分 short range だからこれを対角化し  $\exp(-(\beta/n_0) \cdot \mathcal{H}_i)$  の行列要素を容易に求めることができる。以後, 簡単のために  $(-\beta/n_0) \cdot \mathcal{H}_i \Rightarrow \mathcal{H}_i$  とする。

$\langle \alpha | \exp(-\mathcal{H}_i) | \alpha \rangle$  が求まるから, (5)式は

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \exp(-\beta\mathcal{H}) | \alpha \rangle_{n=n_0} &= \sum_{|\beta_{ij}\rangle} \langle \alpha | \exp(-\mathcal{H}_1) | \beta_{11} \rangle \langle \beta_{11} | \\ & \quad \dots \dots \langle \beta_{n_0-1, p-1} | \exp(-\mathcal{H}_p) | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

$i = 1, \dots, n_0-1$   
 $j = 1, \dots, p$

と求めることができ, Monte Carlo 法はこの範囲で原理的に可能になる。

しかし  $|\beta_{i,j}\rangle$  の和を厳密に行うことは, 古典系で Monte Carlo 法を用いずに  $|\alpha\rangle$  についての和をとると同程度の計算であり一般に実行困難である。そこでこの和も Monte Carlo 法を用いて計算するのが便利である。つまり Monte Carlo の 1 状態として

$|\alpha\rangle$  ではなく  $\{|\alpha\rangle, |\beta_{i,j}\rangle \mid i=1, \dots, n_0-1, j=1, \dots, p-1\}$  (以後  $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$  と書く) をとるのである。すなわち  $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$  が

$$\langle \alpha | \exp(-\mathcal{H}_1) | \beta_{11} \rangle \cdots \langle \beta_{n_0-1, p-1} | \exp(-\mathcal{H}_p) | \alpha \rangle$$

の確率で現われるように step させるのである。

実行する上でもう 1 つ困難なことは、 $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$  を  $((n_0-1) \times (p-1) + 1)$  個の独立な状態の直積として扱うことである。しかしこれも  $\mathcal{H}_i$  が十分 short rang であることを用いれば解決する。つまり  $\langle \beta_{ij} | \exp(-\beta \mathcal{H}_j) | \beta_{i, j+1} \rangle \neq 0$  であるためには  $|\beta_{ij}\rangle$  と  $|\beta_{i, j+1}\rangle$  とは  $\mathcal{H}_j$  の range 以外では一致していなければならないことを利用すると、short range の中で互いに相互作用している点の数、 $N_0$ 、だけ独立な configuration をもって来て、 $\langle \beta_{i, j} | \exp(-\mathcal{H}_i) | \beta_{i, j+1} \rangle$  は  $\mathcal{H}_j$  が関係しているところだけの行列要素であるとすれば  $(p-1)$  個の独立な  $|\beta_{ij}\rangle$  は  $N_0$  個の独立な configuration におきかえられる。そこでこの  $(N_0 \times (n_0-1) + 1)$  個の configuration 全体を  $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$  と見なおすことができるのである。この configuration の中では  $\langle \beta_{ij} | \exp(-\beta \mathcal{H}_j) | \beta_{i, j+1} \rangle$  は  $\mathcal{H}_j$  に関係している  $|\beta_{ij}\rangle$  および  $|\beta_{i, j+1}\rangle$  の中の点の関数になる、つまり configuration の中の点に関して対角化されているとあってよい。このことは初めハミルトニアン  $\mathcal{H}$  で与えられた量子系は  $n = n_0$  の近似で  $(N_0 \times (n_0-1) + 1)$  個の configuration を 1 状態とする対角化された系、つまり古典系で表現されることを示している。この対角化された系の configuration は初めの  $|\beta_{ij}\rangle$  の configuration に対し  $n_0$  のために 1 次元だけ次元が高い configuration になっている。

この新しい次元の方向を n 方向 と呼ぶことにする。

以上で 1-dim だけ次元が高い系を考えることによって量子系でも、ある近似内で Monte Carlo 法が実際に実現可能であることがわかった。

新しい configuration の中でのエネルギーの計算は注意しなくてはならない。

$$\begin{aligned} \langle E \rangle \cdot Z &= -\frac{\partial}{\partial \beta} Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | e^{-\beta \mathcal{H}} | \alpha \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | \left( \prod_{i=1}^p e^{-\mathcal{H}_i} \right)^{n_0} | \alpha \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{|\alpha\rangle, k} \langle \alpha | e^{-\mathcal{H}_1} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} \cdots e^{-\mathcal{H}_p} | \alpha \rangle \end{aligned}$$

( $k$  は ( $n_0 \times p$ ) 個の  $e^{-\mathcal{H}_k}$  のすべて)

$$\begin{aligned}
 &= - \sum_{\substack{|\alpha\rangle, k \\ |\beta_{ij}\rangle}} \langle \alpha | e^{-\mathcal{H}_1} | \beta_{11} \rangle \cdots \langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle} \\
 &\quad \cdots \cdots \langle \beta_{n_0-1} | e^{-\mathcal{H}_p} | \alpha \rangle \\
 &= - \sum_{\substack{|\alpha\rangle \\ |\beta_{ij}\rangle}} [ \langle \alpha | e^{\mathcal{H}_1} | \beta_{11} \rangle \cdots \langle \beta_{n_0-1} | e^{-\mathcal{H}_p} | \alpha \rangle ] \cdot \left\{ \sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle} \right\}
 \end{aligned}$$

(2式より)

$$\langle E \rangle_{\text{M.C.}} = \sum_{|\alpha, \beta_{ij}\rangle_{\text{M.C.}}} \sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle} \Bigg\} \Bigg/ \text{(Monte Carlo steps)} \quad (7)$$

同様にして, 比熱  $C$  は

$$\begin{aligned}
 kT^2 C_{\text{M.C.}} &= \frac{\sum_{\text{M.C.}} \left\{ \left( \sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle} \right)^2 - \sum_k \left( \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle} \right)^2 \right\}}{\text{Monte Carlo steps}} \\
 &\quad + \sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle} \Bigg\} - \langle E \rangle_{\text{M.C.}}^2 \quad (8)
 \end{aligned}$$

### § 3. Spin 系の Monte Carlo 法

以上で考えた方法を nearest neighbour interaction をもつ スピン系で考える。

ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} k_x s_i^x s_j^x + k_y s_i^y s_j^y + k_z s_i^z s_j^z \quad (9)$$

系の状態を表示する方法として  $s_i^z$  を対角化する表示の直積をとることにする, もちろんこれは  $\mathcal{H}$  を対角化しない。  $\mathcal{H}_i$  として

$$\mathcal{H}_i = k_x s_i^x s_j^x + k_y s_i^y s_j^y + k_z s_i^z s_j^z \quad (10)$$

をとる。ここで  $\exp(-\mathcal{H}_i)$  の行列要素を求める。

$$\exp(-\mathcal{H}_i) = \tilde{a} \begin{pmatrix} 1 + X_3, 0, 0, X_1 - X_2 \\ 0, 1 - X_3, X_1 + X_2, 0 \\ 0, X_1 + X_2, 1 - X_3, 0 \\ X_1 - X_2, 0, 0, 1 + X_3 \end{pmatrix} \begin{matrix} | \uparrow \uparrow \rangle \\ | \uparrow \downarrow \rangle \\ | \downarrow \uparrow \rangle \\ | \downarrow \downarrow \rangle \end{matrix} \quad (11)$$

$$\tilde{a} = \cosh k_x \cosh k_y \cosh k_z - \sinh k_x \sinh k_y \sinh k_z$$

$$X_1 = (\tanh k_x - \tanh k_y \tanh k_z) / (1 - \tanh k_x \tanh k_y \tanh k_z)$$

$X_2, X_3$  は  $x, y, z$  を cyclic にかえたもの

となる。

以後  $k_x = k_y = k_z = k$  Heisenberg Model

$k_x = k_y = k, k_z = 0$   $XY_{\perp}$  Model

$k_x = k_z = k, k_y = 0$   $XY_{\parallel}$  Model と呼ぶことにする。

1次元ふえた  $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$  の configuration 中の相互作用は 4点  $\sigma_i \sigma_j \sigma'_i \sigma'_j$  の 4体力であると考えられる。

今  $n_0 = 1$  とすると 1次元系では  $S_i$  と相互作用しているのは  $S_{i-1}$  と  $S_{i+1}$  の 2つだから新しい configuration は  $\beta, \beta'$  の 2つ, これを図示すると

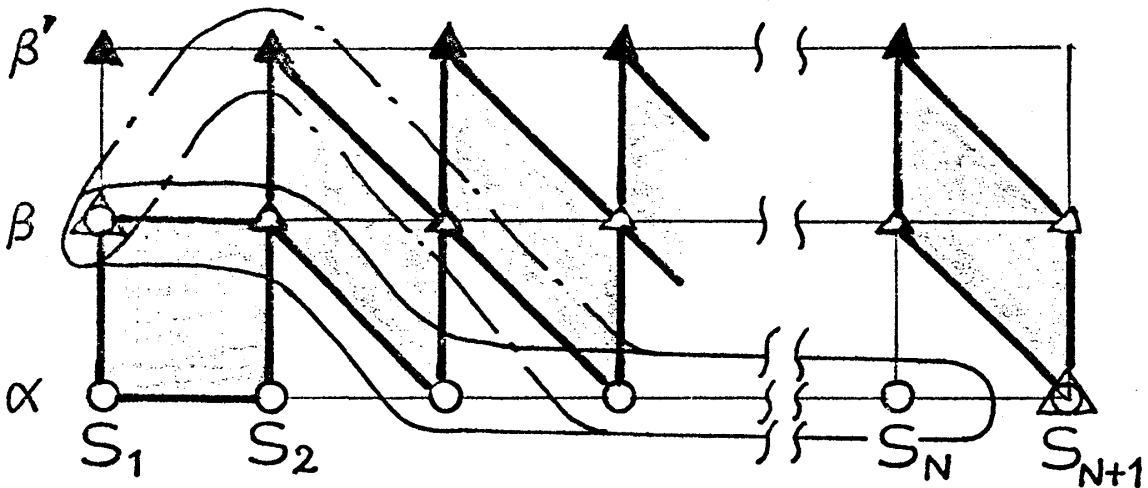


Fig. 1 一次元量子スピン系で  $n_0 = 1$  のときの configuration

相互作用は  $\square$  で示した 4 体力である。この configuration と  $|\alpha\rangle$ ,  $|\beta_{ij}\rangle$  との関係は  $|\alpha\rangle$  は  $\circ$  印,  $|\beta_{11}\rangle$  は  $\square$  で囲んだもの,  $|\beta_{12}\rangle$  は  $\square$  で囲んだもの, etc である。また  $\triangle$  は一致する。

また  $\text{trace} \langle \alpha | \dots | \alpha \rangle$  より,  $|\alpha\rangle$  と最終状態,  $\blacktriangle$  印は一致しなければならない。これは  $n$  方向の cyclic boundary condition を与える。

ここで  $\langle \alpha \beta \beta' |$  について Monte Carlo 法を行えばよいのだが  $n_0 = 1$  の場合は鈴木<sup>4)</sup> の pair product model によって解析的に解かれている。そこで  $n_0 = 2$  の場合つまり  $|\alpha \beta \beta' \beta'' \beta'''\rangle$  について Monte Carlo 法を実行してみることにする。

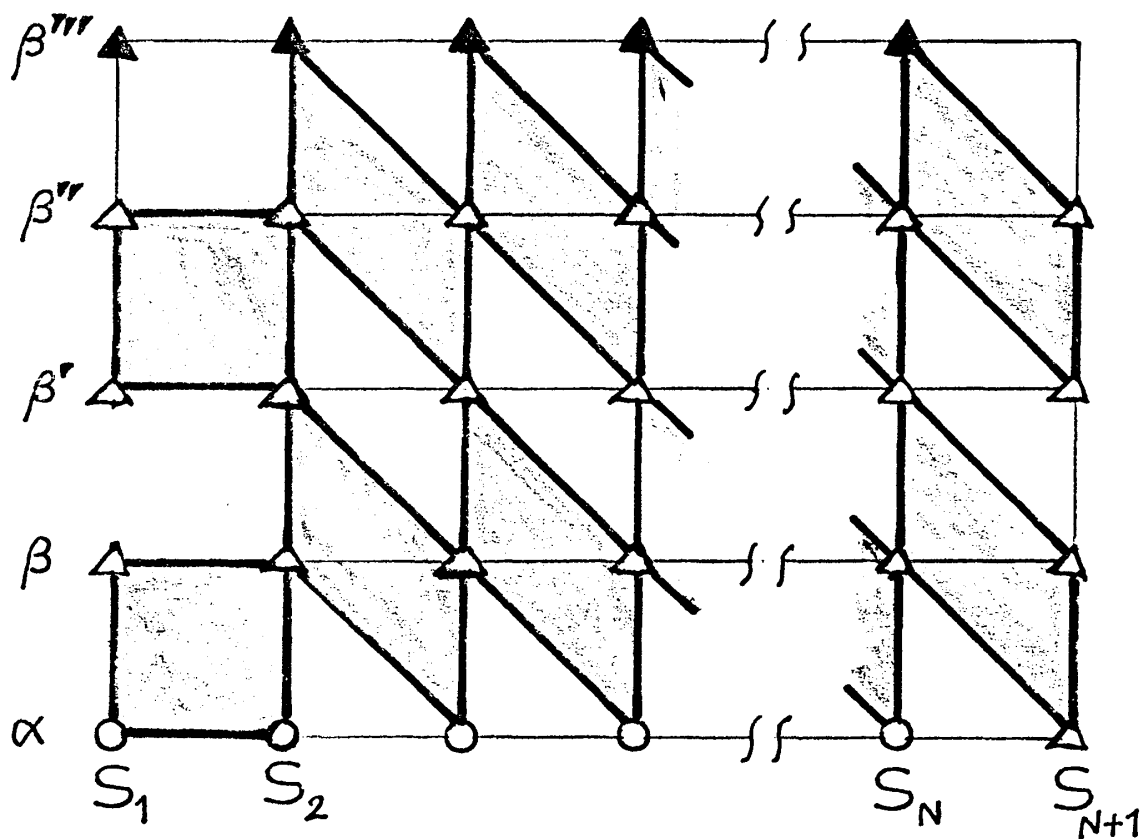


Fig. 2 一次元量子スピン系で  $n_0 = 2$  のときの configuration

Monte Carlo 実行時に注意しなくてはならないことは(11)式を見てわかるように  $\exp(-\mathcal{H}_i)$  の行列要素が 0 のところがたくさんあるため, もとの configuration で 1 つの

Spin を表わしている  $(2n_0 + 1)$  個の  $\sigma$  を同時に flip させることが重要である。

この simulation の結果得られた、エネルギー、比熱、帯磁率は以下の通りである。それぞれ厳密解、 $n_0 = 1$  (解析解) と比較してある。

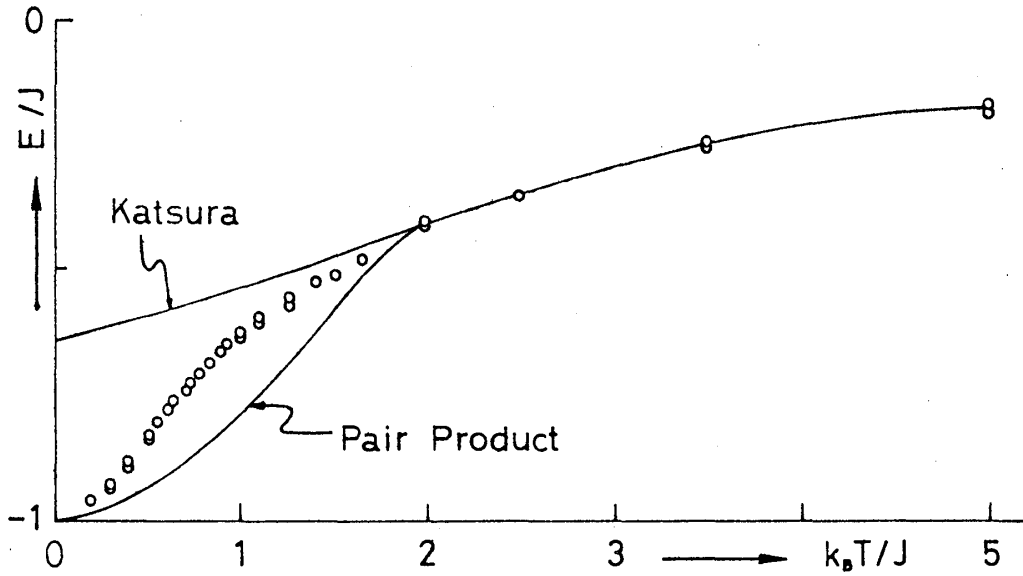


Fig. 3 一次元量子スピン系 Heisenberg Model のエネルギーと温度の関係

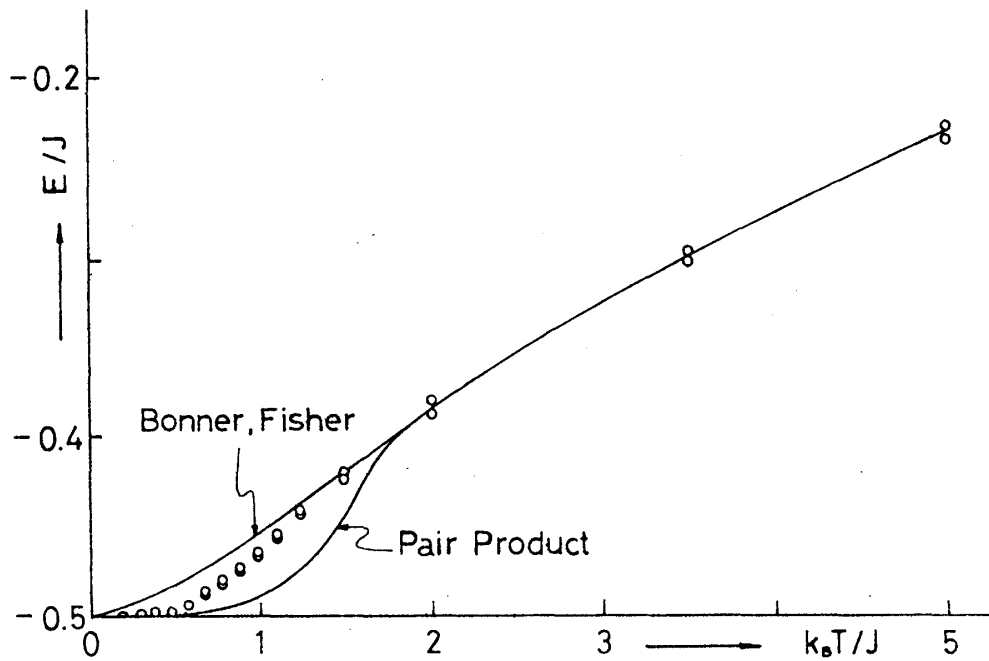


Fig. 4 一次元量子スピン系 XY-Model のエネルギーと温度の関係

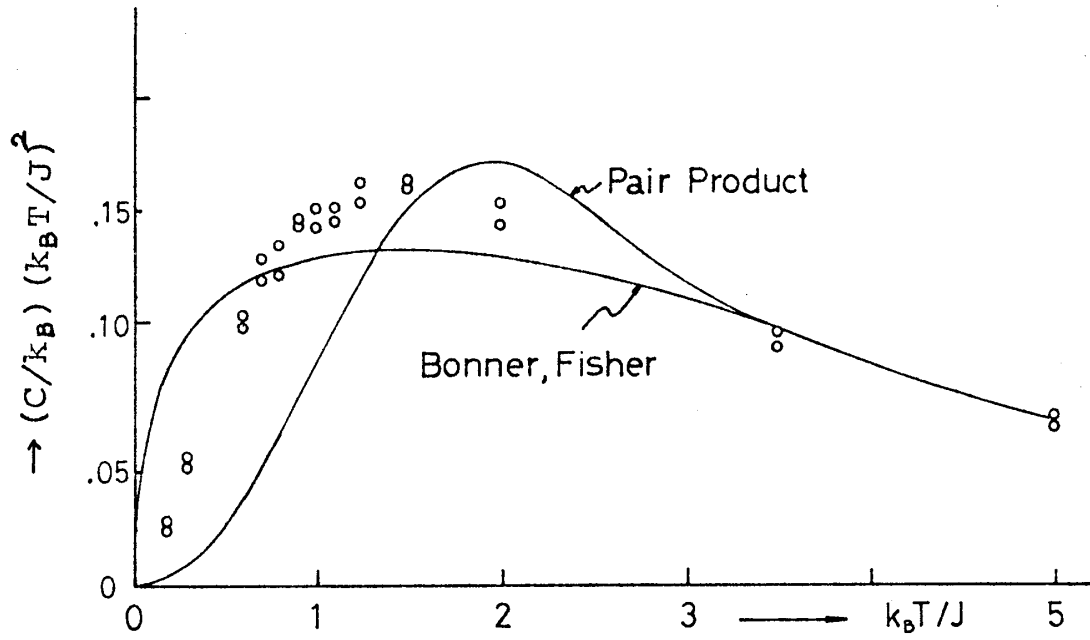


Fig. 5 一次元量子スピン系 Heisenberg Model の比熱と温度の関係

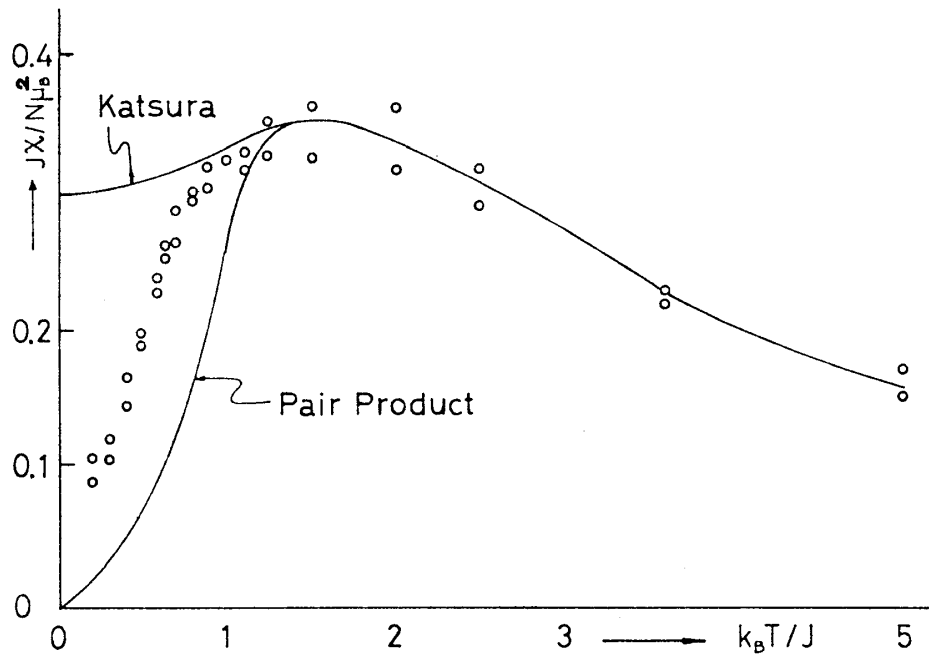


Fig. 6 一次元量子スピン系 XY-Model の z 軸方向の帯磁率 (スピン相関の和) と温度の関係



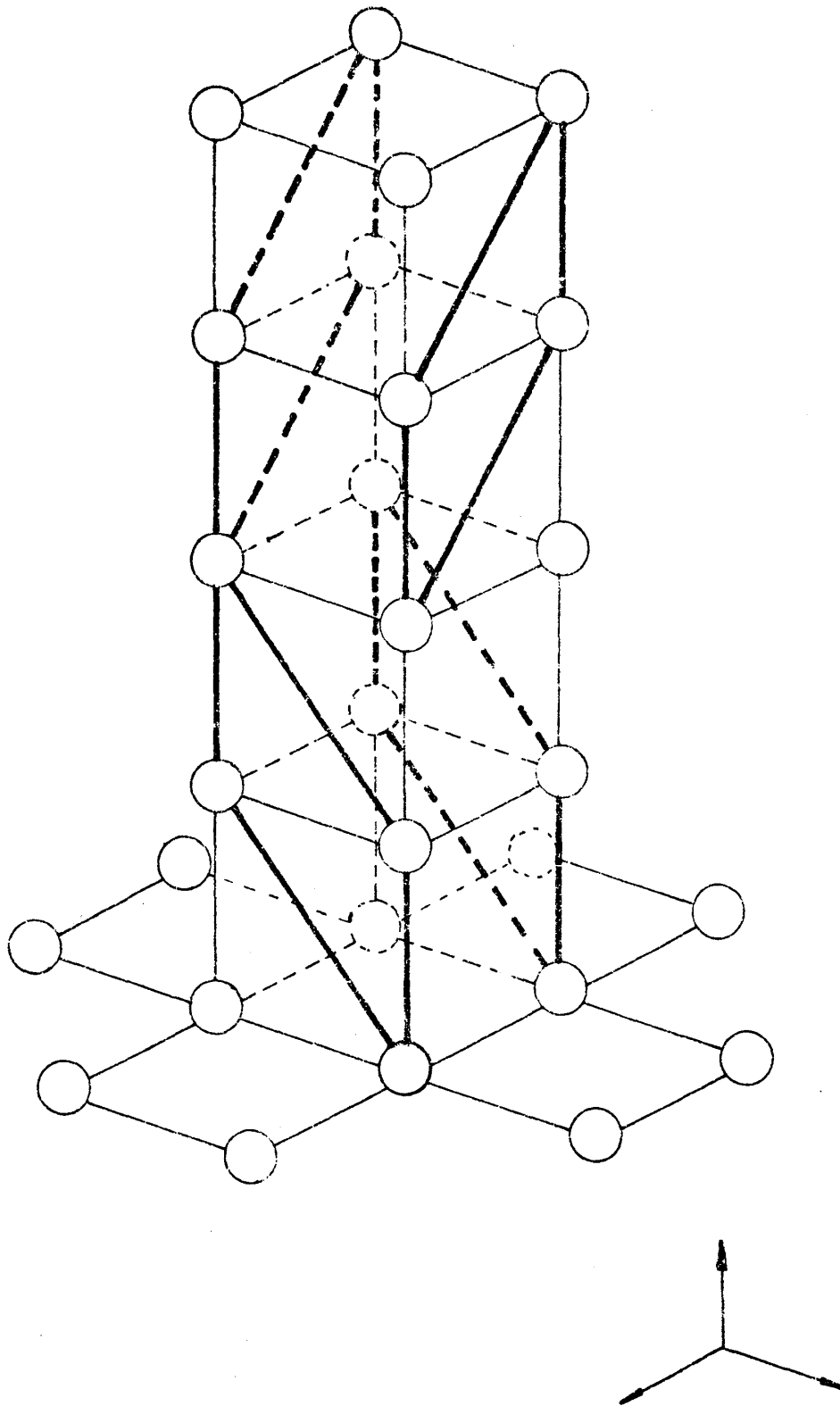
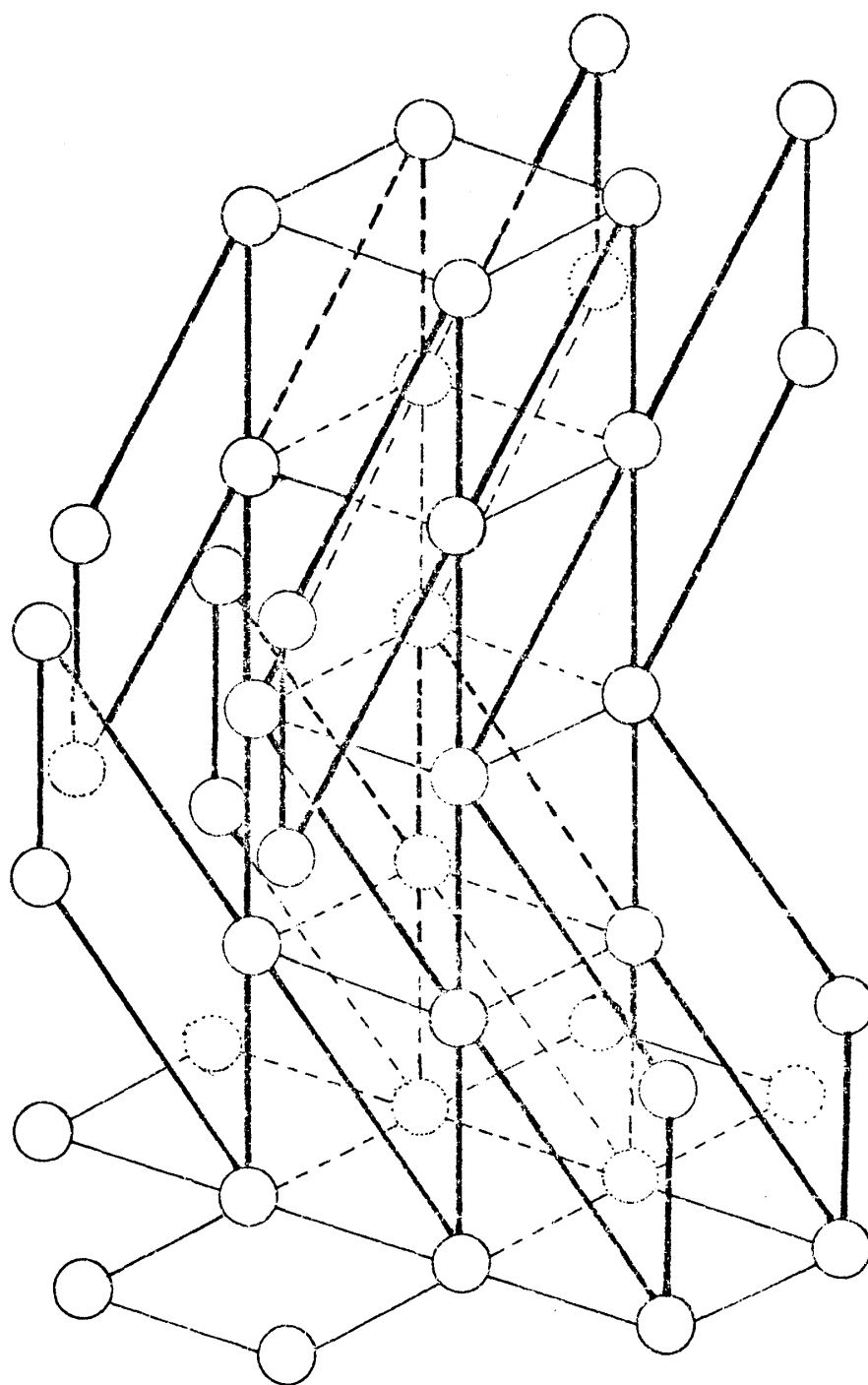
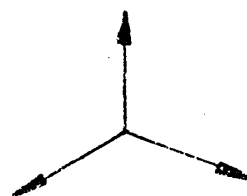


Fig. 7 二次元量子スピン系の  $n_0 = 1$  のときの configuration  
(a) column が 4 本の場合の 4 体力の図



(b) column が 12 本の場合の 4 体力の図。  
simulation のとき周囲 8 本の column のスピ  
ンの状態を条件として与え, 中の 1 本のスピ  
ンの状態を flip させる。



次に2次元系の場合について考えてみる。ハミルトニアンとして

$$\mathcal{H} = \sum_j \sum_i (k_x s_{ij}^x s_{i+1,j}^x + k_y s_{ij}^y s_{i+1,j}^y + k_z s_{ij}^z s_{i+1,j}^z) \\ + \sum_i \sum_j (k_x s_{ij}^x s_{i,j+1}^x + k_y s_{ij}^y s_{i,j+1}^y + k_z s_{ij}^z s_{i,j+1}^z) \quad (12)$$

$\mathcal{H}_i$  とて1次元の場合と同様にとり、その並らべ方を(12)式で内側の  $\Sigma$  から評価していく順に並らべるとすると Fig. 1 に相当する図は Fig. 6 を平面上にならべたものになる。

この simulation (2次元XY model) は最近興味を持たれている系であるが、帯磁率に特異性をもち、比熱に発散がないという Betts et al.<sup>5)</sup> と Kosterlitz<sup>6)</sup> らの結果を支持している。この結果の詳細については本誌別稿(鈴木, 宮下, 黒田, 川端「2次元量子スピン系および古典スピン系のモンテ・カルロ法による研究 — 渦生成型の相転移 —」を参照して下さい。

#### 参 考 文 献

- 1) L. D. Fosdick in *Method in Computational Physics* (edited by B. Alder et al.) Vol. 1 P. 245
- 2) K. Binder in *Phase Transition and Critical Phenomena* Vol. 5B. (edited by C. Domb and M. S. Green) Academic Press, New York.
- 3) M. Suzuki Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454
- 4) M. Suzuki J. Phys. Soc. Japan **21** (1966) 2274
- 5) D. Betts in *Phase Transition and Critical Phenomena* Vol. 3.
- 6) J. M. Kosterlitz J. Chem. Phys. **7** (1974) 1046.
- 7) J. C. Bonner, F. M. Fisher Phys Rev. **135** (1964) A640
- 8) S. Katsura, Prog. Theor. Phys. **20** (1958), 192