

## 量子系のモンテカルロシミュレーション

名古屋大学工学部 本 間 重 雄

九州大学理学部 松 田 博 嗣

理化学研究所 荻 田 直 史

( 1985年5月7日受理 )

## § 1 序

大型計算機が統計物理学における重要な研究手段の一つとして登場して以来、計算機による量子多体系の研究、とりわけ「如何にしてこの量子系をモンテカルロシミュレーション(MC)にのせ、系の熱力学的性質を研究するか」と云う事が重要な課題であった。この課題についての一つの試みが M. Suzuki により行われた<sup>1)</sup>。彼は Trotter の定理を拡張し、 $d$ 次元量子系はその系に Trotter 次元を付加して作った  $d+1$ 次元古典系と等価である事を示して、この  $d+1$ 次元古典系での MC の実行可能性を示唆した。

これが契機となり、Suzuki のグループを始めとして、諸外国でのこの方法による量子系での MC が積極的に行なわれ、主として一次元量子系で数々の成果が得られている<sup>2)</sup>。

しかし、この“一般化された Trotter 公式”を高次元へ適用することは容易でないと思われる。実際、三次元量子系の MC を実行しようとするれば、変換された四次元古典系での MC を行なう必要があり、取るべき四次元格子の構造、次元を付加したことによる計算時間の増加等難問が多いと推察出来る。

結局のところ、 $d$ 次元量子系の MC を行なうのに  $d$ 次元は  $d$ 次元として扱う方法があれば良い訳である。

我々は古典系での MC 法の直接的な拡張として以下に述べる decoupled cell method (以下 DCM で略記) を考案し<sup>3)</sup>、この方法の有効性を具体的な系で試み有意義な結果を得たので以下に報告する。

次節では一次元量子スピン系を具体例とし、DCM を詳述する。§ 3 では一次元 XY - 模型 ( $S = 1/2$ ) に DCM を適用し、得られた結果を示す。

§ 2 Decoupled Cell Method

外磁場中にある, 異方的交換相互作用が隣接格子点間に働く一次元鎖を考える。系の Hamiltonian は次式で与えられる。

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (J_x \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + J_y \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y + J_z \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z) - H \sum_i \hat{\sigma}_i^z \quad (2.1)$$

格子点は  $N$  個, 周期境界条件を用いる。  $(\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^y, \hat{\sigma}_i^z)$  は Pauli の spin operator,  $(J_x, J_y, J_z)$  は交換相互作用の大きさを表わす。  $H$  は  $z$  方向の磁場である。

spin operator の対角方向 (表現) は  $(\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^y, \hat{\sigma}_i^z)$  の線型結合により次式の様に見える。

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= l \hat{\sigma}^x + m \hat{\sigma}^y + n \hat{\sigma}^z \end{aligned} \quad (2.2)$$

ここに  $(l, m, n)$  は対角方向と  $(x, y, z)$  軸との方向余弦である。  $z$  方向を対角にするためには  $l = m = 0, n = 1$  とすればよい。

ここで系の任意の格子点  $i$  に着目する。次に系を, 点  $i$  を含む部分  $L_i^{(\nu)}$ , そうでない部分  $\bar{L}_i^{(\nu)}$  とに二分する。(第一図)  $L_i^{(\nu)}$  部分は着目した点  $i$  とその左右  $\nu$  個, 合計  $(2\nu+1)$  個の格子点から成る;  $L_i^{(\nu)} = (i-\nu, i-\nu+1, \dots, i, i+1, \dots, i+\nu)$ 。  $\bar{L}_i^{(\nu)}$  部分は残りの格子点を含む;  $\bar{L}_i^{(\nu)} = (1, 2, \dots, i-\nu-1, i+\nu+1, \dots, N-1, N)$ 。

部分  $L_i^{(\nu)}$  の spin 状態を  $S_i^\sigma$  と書く;  $S_i^\sigma = (\sigma_{i-\nu}, \sigma_{i-\nu+1}, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_{i+\nu})$ 。ここで上付きの  $\sigma$  は  $\sigma_i$  の取る値  $\sigma (= \pm 1)$  であることを示す。更に部分  $\bar{L}_i^{(\nu)}$  の spin 状態を  $\bar{S}_i$  で表わす;  $\bar{S}_i = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{i-\nu-1}, \sigma_{i+\nu+1}, \dots, \sigma_N)$ 。全系の spin 状態は, 従って,  $(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$  で与えられる。この時の状態ベクトルを  $|S_i^\sigma, \bar{S}_i\rangle$  と書くと, 状態  $(S_i^\sigma, \bar{S}_i) \sim$  出現確率  $P(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$  は

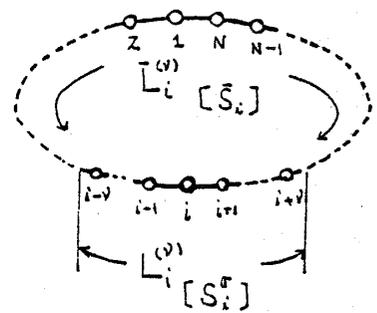


図 1

$$P(S_i^\sigma, \bar{S}_i) = \frac{\langle S_i^\sigma, \bar{S}_i | \exp(-\beta H) | S_i^\sigma, \bar{S}_i \rangle}{\text{Tr} \exp(-\beta H)} \quad (2.3)$$

ここに  $\beta = (k_B T)^{-1}$  であり,  $k_B$  は Boltzmann 定数,  $T$  は系の温度を表わす。

次に  $i$ -site の spin を反転させた状態を考える。この際残りの spin 状態は固定しておく。この  $i$ -site spin のみを反転させた状態は上記の notation を用いて  $(S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i)$  と書け, 状態ベクトルは  $|S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i\rangle$  であるから, 状態  $(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i)$  と  $(S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i)$  との出現確率の相対比  $q(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i)$  は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} q(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i) &= \frac{P(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i)}{P(S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i)} \\ &= \frac{\langle S_i^{\sigma}, \bar{S}_i | e^{-\beta H} | S_i^{\sigma}, \bar{S}_i \rangle}{\langle S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i | e^{-\beta H} | S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i \rangle} \end{aligned} \quad (2.4)$$

(2.4) で定義された  $q$  だけが MC (古典系, 量子系にかかわらず) に重要な量で, 状態  $(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i)$  から  $(S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i)$  への遷移確率  $W(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i)$  を熱平衡において詳細釣り合いが成立つように

$$W(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i) = \begin{cases} q(S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i) & (q(S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i) < 1) \\ 1 & (q(S_i^{-\sigma}, \bar{S}_i) \geq 1) \end{cases} \quad (2.5)$$

を与えるとそれに従うマルコフ鎖の時系列よりカノニカル集合が求められる。従って如何にして  $q(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i)$  を求めるかが (古典系にしる量子系にしる) 問題である。

古典系の例として最隣接相互作用のある一次元 Ising 模型では,  $q$  は  $L_i^{(\nu)}$  ( $\nu = 1$ ) のスピン構造のみに依存し,  $\bar{S}_i$  には関係しない。

実際  $q$  は

$$\begin{aligned} q(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i) &= q(S_i^{\sigma}) \\ &= \exp[\beta \{ J_z (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + 2H \} \sigma] \end{aligned} \quad (2.6)$$

であり, (2.6) を (2.5) に用いれば一次元 Ising 模型での MC が実行出来る。

要するに問題は「系を与えた時,  $q(S_i^{\sigma}, \bar{S}_i)$  をどの様にして量子力学的に求めるか」にある。量子系では  $q$  は  $S_i^{\sigma}$  のみならず  $\bar{S}_i$  にも依存する。

しかし次の推論は正しいであろう。『 $q$  の  $\bar{S}_i$  依存性は  $\nu$  を増すと共に減少していく。』

(A)

以上の考えに基づいて  $q$  の量子力学的導出を次の二つの手続きで計算する。

(1)

部分系  $L_i^{(\nu)}$  (これが decoupled cell (DC) である。) を取り出し, この cell に対する Hamiltonian を書く。

$$H_i^{(\nu)} = -\frac{1}{2} \sum_{j=i-\nu}^{i+\nu-1} (J_x \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + J_y \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y + J_z \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z) - H \sum_{j=i-\nu}^{i+\nu} \hat{\sigma}_j^z \quad (2.7)$$

(2)

$q(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$  を求める。これを推論 (A) により次式で近似する。

$$\begin{aligned} & q(S_i^\sigma, \bar{S}_i) \\ & \Downarrow \\ & q(S_i^\sigma) = \frac{\langle S_i^\sigma | \exp(-\beta H_i^{(\nu)}) | S_i^\sigma \rangle}{\langle S_i^{-\sigma} | \exp(-\beta H_i^{(\nu)}) | S_i^{-\sigma} \rangle} \end{aligned} \quad (2.8)$$

(2.8) の右辺は大型計算機を用いて  $H_i^{(\nu)}$  の固有値, 固有ベクトルを求めることにより, 容易に計算出来る。DC 中のスピン ( $S = 1/2$ ) の総数は  $(2\nu+1)$  個だから,  $f (= 2^{2\nu+1})$  行  $f$  列の行列を対角化しさえすればよい。

求まった固有値, 固有ベクトルを  $\{E_\alpha, \phi_\alpha\}$   $\alpha = 1, 2, \dots, f$  とおくと (2.8) は結局次式になる。

$$q(S_i^\sigma) = \frac{\sum_{\alpha=1}^f |\langle S_i^\sigma | \phi_\alpha \rangle|^2 e^{-\beta E_\alpha}}{\sum_{\alpha'=1}^f |\langle S_i^{-\sigma} | \phi_{\alpha'} \rangle|^2 e^{-\beta E_{\alpha'}}} \quad (2.9)$$

この様にして求めた  $q(S_i^\sigma)$  を  $q(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$  として用いることにより, 従来古典系で行なわれていた MC の手法をそのまま用いる事が出来, 従って量子系での MC が次元数を増すことなく実行出来る。これが DCM による量子 MC であり, 容易にわかる様にすぐに, 二, 三次元量子系, fermion 系へ拡張, 実行可能である。

この方法の限界は  $H_i^{(\nu)}$  が張る部分空間の大きさ, つまり  $\nu$  についてどこまで現在の計算機で処理出来るか, 及び  $H_i^{(\nu)}$  が作る行列を如何に効率良く求めるかに依存している。

DCM の有用性を試験するため, 厳密解<sup>4)</sup> が知られている一次元 XY-模型 ( $S = 1/2$ ) で実際に MC を実行した。この結果を次節に述べる。

## § 3 一次元XY模型でのMCと結果

系の Hamiltonian は次式で与えられる。

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i=1}^N (\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y) \quad (3.1)$$

観測したい物理量に応じて  $\hat{\sigma}$  の対角方向を定める。

(1)  $\hat{\sigma}^x$  を対角にした場合。

$$\text{内部エネルギー} \quad \epsilon = -(N)^{-1} \sum_{i=1}^N J \langle \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x \rangle, \quad (3.2)$$

$$\text{磁化の自乗平均} \quad m_2 = (N k_B T)^{-1} \langle (\sum_i \hat{\sigma}_i^x)^2 \rangle, \quad (3.3)$$

$$\text{相関関数} \quad C(r) = \langle \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+r}^x \rangle \quad (3.4)$$

を求めることが出来る。この時  $\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y$  は

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

で与えられ、(2.2)に於て  $l=1, m=n=0$  である。模型(3.1)は  $(\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y)$  について対称であるから、 $\hat{\sigma}^x$ -対角の場合についてのみMCを実行すれば量(3.2), (3.3), (3.4)を求め得る。

(2)  $\hat{\sigma}^z$  を対角にした場合

$$\text{垂直感受率} \quad \chi_L = \langle (\sum_i \hat{\sigma}_i^z)^2 \rangle / N k_B T. \quad (3.6)$$

を求めることが出来る。この時、 $\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y$  は次式で与えられる。

$$\hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

：具体的なMCの実行手順：

- decoupled cell の大きさを決める。(  $i, e, \nu$  の値を決める。)
- 求めたい観測量(実験値)に応じて operator の対角表現の方向を決める。
- 基底ベクトルの組  $\{ |\psi_n\rangle \}$ ,  $n=1, 2, \dots, 2^{2\nu+1}$  を作る。
- 行列要素  $\langle \psi_l | H_i^{(\nu)} | \psi_m \rangle \equiv \langle l | H_i^{(\nu)} | m \rangle$  を求める。
- 行列  $\{ \langle l | H_i^{(\nu)} | m \rangle \}$  を対角化することにより (decoupled cell での) 固有値  $E_\alpha$ ,

固有ベクトル  $\phi_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots, 2^{2\nu+1}$  を求める。

(f) (2.9)により  $q(S_i^\sigma)$  ( $= q(|\psi_n\rangle)$ ), 即ち  $W$  を求める。

ここまでの第一段階であり,  $\nu$  を data として input すれば, 全ては計算機で処理出来る。次は MC を実行することになる。

(g) 系の size  $N$  を決める。

(h) 格子点  $i$  を乱数により選び出しこれを中心とする左右  $\nu$ , 合計  $2\nu+1$  個の spin 状態  $S_i^\sigma$  を識別する。状態  $S_i^\sigma$  への遷移確率  $W$  を参照し, メトロポリス法により状態間の遷移を判断し, 次の状態に移る。

(i) 観測する物理量が平衡 (と思われる) 値に到達するまで (h) の手続きをくり返す。

(j) “満足” が行くまで  $(\nu, N)$  を変えて, 実験を続ける。

step (a)→(j) を  $(\nu, N)$  を Parameter として, 一つの program にまとめておけば, 現在の計算機の能力, 時間, 費用の限界につき当るまで  $(\nu, N)$  を増加させるのみで, MC を実行出来る。

(a)~(j) に従って  $\nu = 1, 2, 3$ .  $N = 32, 64, 100, 128, 1024$  と変え  $\epsilon, m_2, \chi_\perp, C(r, T)$  を求めた。  $\epsilon, m_2, \chi_\perp$  の結果を図 2(a), (b), (c) に示す。  $m_2$  については  $\nu = 3, N$

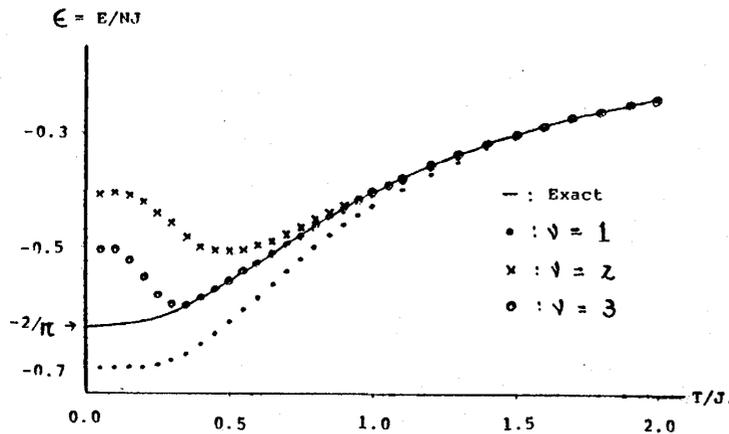


図 2(a) 一格子点当りの内部エネルギー  $\epsilon$ 。(DC(FE)による。) 実線は S. Katsura による厳密解<sup>4)</sup>を示す。

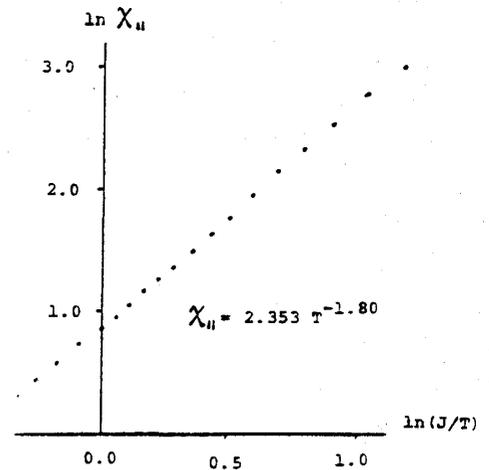


図 2(b) 磁化の自乗平均  $m_2$ 。(DC(FE)による。)

$= 1024$ , それ以外は,  $N = 100$  の結果である。  $\nu$  の増加に伴って近似が良くなる事がわかる。  $N \gtrsim 2(2\nu+1)$  であれば観測量の  $N$ -依存性はなくなる。

step (d)~(f) で遷移確率  $W$  を求める際 decoupled cell (DC) の境界を自由端にするか, DC をトーラスにするかで  $W$  は異なる。前者を DC(FE), 後者を DC(TR) と略記しよう。

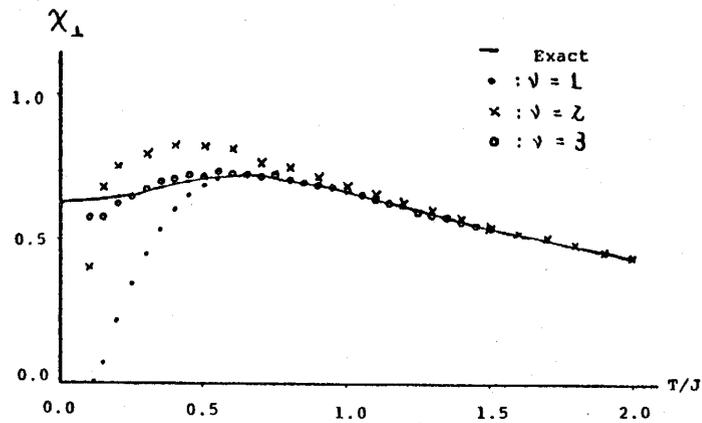


図2(c) 面外(垂直)感受率  $\chi_{\perp}$ 。(DC(FE)による。) 実線は S. Katsura による厳密解<sup>4)</sup>。

Wは低温領域で異なる。図2はDC(FE)を用いた結果である。DC(TR)を用いたWによるMCの結果を  $\epsilon$ ,  $m_2$ ,  $\chi_{\perp}$  について図3(a), (b), (c)に示しておく。 $\epsilon$ についてはDC(FE)でみられた低温での急激な変化(大きな負の比熱)は減少するが、厳密解を再現する温度領域はやや狭まる。しかし、どちらにしても  $\nu$  の増加によりMCの結果が厳密解に近づく事実には変わりはない。

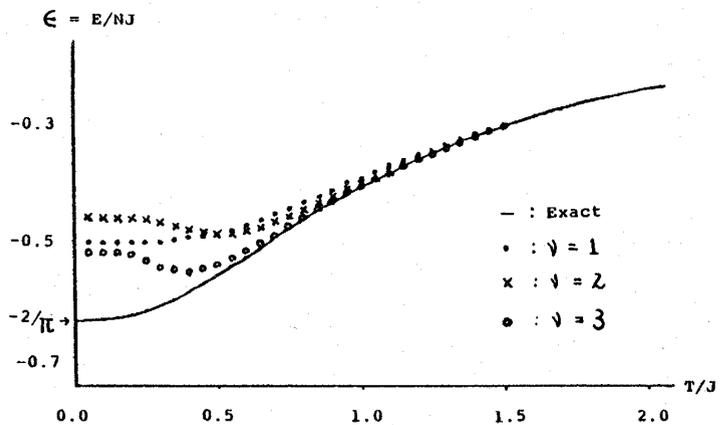


図3(a) 一格子点当りの内部エネルギー  $\epsilon$ 。(DC(TR)による。)

次に相関関数  $C(r, T) = \langle \sigma_i^x \times \sigma_{i+r}^x \rangle \equiv \langle \sigma^x(0) \sigma^x(r) \rangle$  をMCで求めた結果を述べる。

一次元XY-模型は相転移を示さないから  $C(r, T)$  は次の様に書けるであろう。

$$C(r, T) = \langle \sigma^x(0) \sigma^x(r) \rangle = C_0(r, T) e^{-\alpha(T)r} \quad (3.8)$$

量  $\alpha(T)$  は相関距離  $\xi$  の逆数であり、

$$\alpha(T) = \xi^{-1} = \alpha_0 T^\nu \quad (3.9)$$

である。

本間重雄, 松田博嗣, 萩田直史

$C_0(r, T)$  の  $(r, T)$ -依存性,  $\alpha(T)$  の  $T$ -依存性を調べる訳だが, ここでは ( $\nu = 3, N = 1024$ ) での MC の結果を用いて解析した。

この場合の MC ステップ数は 25000 である。図 4 は温度 ( $T/J$ ) を Parameter とし,  $-\ln C(r, T)$  を  $r$  を変数としてプロットしたものである。この図から比較的大きい  $r$  の領域では  $C_0(r, T)$  に  $r$ -依存性がなく, 従って  $C(r, T)$  は  $r$  の増加と共に指数関数的に減少することがわかる。

$\alpha(T) (\equiv \xi^{-1})$  を求めるために  $-\ln \alpha(T)$  を  $\ln(J/T)$  を変数としてプロットしたものが図 5 である。

この図から  $\alpha(T)$  は次の様に求まる。

$$\begin{aligned} \alpha(T) &\equiv \xi(T)^{-1} \\ &= 0.825 T \end{aligned}$$

(3.10a)

従って相関距離に対する臨界指数  $\nu$  は 1 となる。これは (古典的) XY-模型での連続体近似で求めたものと同じである<sup>5)</sup>。

次に  $r$  が比較的大きい領域での  $C_0$  の温度依存性をも調べ得るが, 結果は  $C_0$  には殆んど温度依存性はなく,

$$C_0(r, T) = 0.8 \tag{3.10b}$$

と求まった。

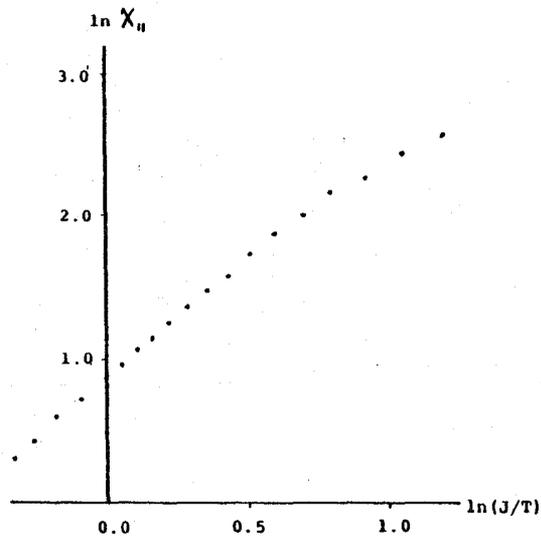


図 3(b) 磁化の自乗平均  $m_2$ 。(DC(TR)による。)

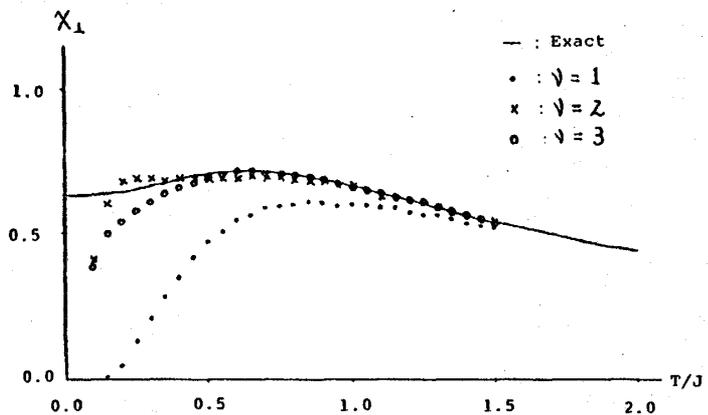


図 3(c) 面外 (垂直) 感受率  $\chi_{\perp}$ 。(DC(TR)による。)

これより相関関数  $C(r, T)$  は

$$C(r, T) = 0.8 e^{-0.825Tr} \quad (3.11)$$

で与えられる  $(r, T)$  依存性を示すことが、我々の MC による結果として求まった。

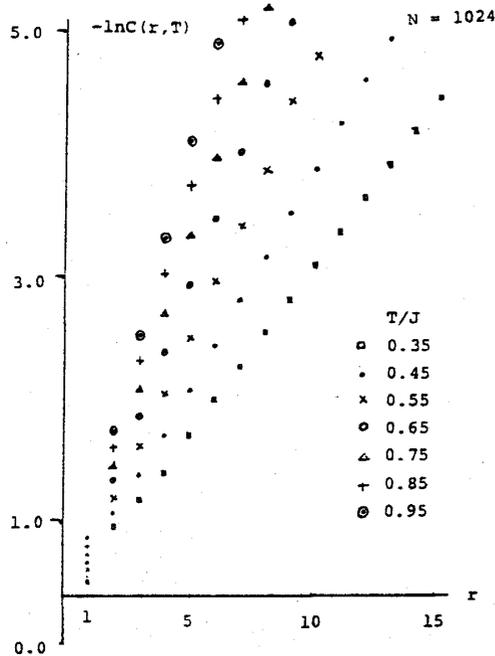


図 4

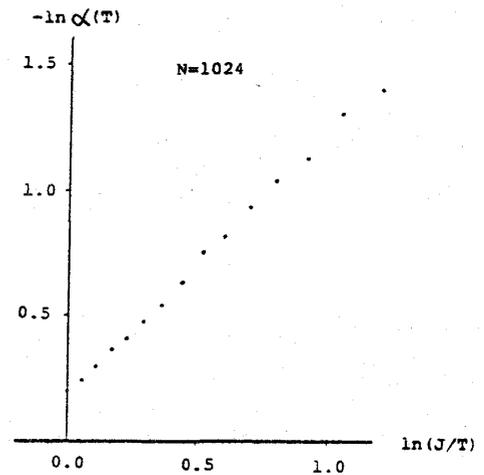


図 5

#### § 4 結 語

我々は古典（格子）系に於る MC 法を直接的に量子（格子）系に拡張した MC 法として、Decoupled Cell Method (DCM) を考案し、実際これを一次元 XY ー模型に適用しその有用性を実証する結果を得た。

前述した様にこの DCM を高次元量子スピン系、フェルミオン系に拡張する事は容易である。

DCM の特徴をまとめると次の二点に要約出来る。

- (i) 次元を増す必要がない。従って仮想的な多体相互作用が混入しない。
- (ii) 従って計算時間が短い。

Trotter 公式による MC は parameter として系の大きさ  $N$ 、Trotter 次元の大きさ  $m$  の二つ  $(N, m)$  を含むのに対して DCM は  $(N, \nu)$  を parameter として含む。

Trotter 公式では  $m$  に対する収束性は議論されているが、DCM では  $\nu$  を大きくすることによる厳密解への接近の仕方は未だ知られていない。

DCM の欠点は

本間重雄, 松田博嗣, 萩田直史

(I)  $\nu$  に対する収束条件が未知である。

(II) 大きい  $\nu$  に対する固有値問題を解くのは大変である。

(III) 長距離相互作用のある系は  $\nu$  を大きく取る必要があり, (II) の困難に出会う。

このうち (II), (III) については計算機の能力が向上すれば解決出来るから本質的な欠点ではない。

近年 restricted geometry での低温物理が実験家の間で盛んになりつつある。我々の考案による DCM が実験事実を理解する上での一助となり, 更には新しい量子現象 (例えば Super Solid の可能性等) をこの方法により予言出来るならば我々にとり望外の喜びである。

なお計算に際しては理化学研究所の FACOM-M 380, 及び名古屋大学大型計算機センターの FACOM-M 382 を用いた。

#### References

- 1) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454
- 2) M. Suzuki, 物性研究 **41** (1984) 393  
J. J. Cullen and D. P. Landau, Phys. Rev. **B27** (1983) 297
- 3) S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita, Prog. Theor. Phys. **72** (1984) 1245
- 4) S. Katsura, Phys Rev. **127** (1962) B1508
- 5) A. Z. Patashinskii and V. I. Pokrovskii, "Fluctuation Theory of Phase Transition" Ch. IV (Pergamon Press)