

量子スピン系のモンテカルロ法

岡山理大、理, 京大、工* 門脇真示, 上田 顯*

量子スピン系の分配関数を評価するための簡便なモンテカルロ法を提案する。本方法はモーメント展開における各項の展開係数を単純選択法により評価するもので、従来用いられている加重選択法にはよっていない。

量子スピン系のためのモンテカルロ法は約 25 年前に Handscomb¹⁾ によって最初に発案された。この方法はその後約 20 年間かえりみられなかったが, Lyklema²⁾ によってかなり実用的な改良がなされた。これとは別に, 10 年前に Suzuki³⁾ によって発案された方法や最近 Homma, Matsuda および Ogita⁴⁾ によって提案された decoupled cell 法があり, 活発に研究がなされている。以下, われわれの方法を紹介する。本方法を適用する系は最近接相互作用をもつスピン 1/2 等方的 Heisenberg 模型による N スピン系である。系のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j - \mu H \sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \quad (1)$$

ここに σ はパウリ・スピン演算子, $J(>0)$ は交換エネルギー, μ は磁気モーメント, H は外場, $\langle ij \rangle$ は最近接格子対である。さて, (ij) で第 i サイトと第 j サイトとのスピン状態を交換する演算子を定義し, Dirac 恒等式

$$\sigma_i \cdot \sigma_j = 2(ij) - 1 \quad (2)$$

を用いると, ハミルトニアンは次のように書き直せる。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (ij) - \mu H \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \frac{1}{2} J N b \quad (3)$$

ここに, N_b はボンドの総数である。定数項を除けば,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (ij) + \mathcal{H}_0 \quad (4)$$

をえる。ただし, \mathcal{H}_0 は (3) 式の第 2 項である。分配関数は次のように展開できる。

$$Z = \text{Tr} (e^{-\mathcal{H}/k_B T}) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{a_r}{r!} (J/k_B T)^r \quad (5)$$

展開係数 a_r は

$$a_r = \sum_{C_r} A(C_r) = \sum_{C_r} \text{Tr} \{ \mathcal{P}(C_r) e^{-\mathcal{H}_0/k_B T} \} \quad (6)$$

で与られ, $\mathcal{P}(C_r)$ は

$$\mathcal{P}(C_r) = (i_1 j_1) (i_2 j_2) \cdots (i_r j_r) (h_1) (h_2) \cdots (h_s) \quad (7)$$

と書き下せる。ただし (h) は第 h サイトのスピン状態を自身に写像する恒等演算子であ

る。つまり各々は(7)式中のどの置換演算子 (i_j) の作用も受けなかったサイトを示すものである。 C_r は集合 $X = \{1, 2, \dots, N_b\}$ から復元抽出された r 個の整数による順序付き r -組 (k_1, k_2, \dots, k_r) を表わす。総和はすべてのとり得る組 C_r についてとる。 k_ℓ はボンドの番号であり、これにより最隣接対 (i_{k_ℓ}, j_{k_ℓ}) が一意的に指定でき、(7)式の置換 $\rho(C_r)$ がえられる。 $\rho(C_r)$ は1から N までの N 個の整数を含んでいるので、 $\rho(C_r)$ は位数 N の置換であり、

$$\rho(C_r) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & N \\ k_1 & k_2 & k_3 & \dots & k_N \end{pmatrix} \quad (8)$$

のように書き直せる。置換群の理論⁵⁾にしたがえば、任意の置換は独立な循環の積に分解できる。つまり、

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & N \\ k_1 & k_2 & k_3 & \dots & k_N \end{pmatrix} = (j_1 j_2 \dots j_{l_1}) (j_{l_1+1} \dots j_{l_1+l_2}) \dots (\dots j_N). \quad (9)$$

(9)式の循環は共通の要素を一つも持たないから、循環の順序には依存しない。したがって(6)式のトレースは次の形のトレースの積として与えられる。

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ (j_{n_1} j_{n_2} \dots j_{n_p}) \exp \left(\mu H \sum_{\ell=1}^p \sigma_{n_\ell}^z / k_B T \right) \right\} \\ = 2 \cosh(p \mu H / k_B T). \end{aligned} \quad (10)$$

積(9)が長さ1の循環を ν_1 個、長さ2の循環を ν_2 個、 \dots とすれば

$$A(C_r) = \prod_{j=1}^N \{ 2 \cosh(j \mu H / k_B T) \}^{\nu_j} \quad (11)$$

をえる。ここに各 ν_j は

$$\nu_1 + 2\nu_2 + 3\nu_3 + \dots + N\nu_N = N \quad (12)$$

を満さなければならぬ。さて原理的には(6)式により各 a_r を求めればよいが、 r が大きくなるにつれ、最新の最高速コンピュータを用いても実行不可能となる。そこで、 a_r を評価するにはモンテカルロ法に頼ることとなる。そのアルゴリズムは次のとおりである。

- I. 展開の第何項目であるかを指定する r を定める。
 - II. 1. 標本空間 $\{1, 2, \dots, N_b\}$ から確率 $1/N_b$ で一様に r 個を復元抽出することにより順序付き r -組 (k_1, k_2, \dots, k_r) をえる。
2. この k_ℓ により最隣接対 (i_{k_ℓ}, j_{k_ℓ}) が一意的に指定できる。これにより、演算子 $\rho(C_r) = (i_{k_1}, j_{k_1}) \dots (i_{k_r}, j_{k_r})$ が決定できる。この $\rho(C_r)$ を独立な循環の積に分解する。
3. (11)式を用いてトレース $A(C_r)$ を求める。
 - III. II. 1~3のステップを指定した回数 n_s だけくり返し、各 $A(C_r)$ の和をとる。この時点で a_r を $N_b^r \left[\sum_{m,c} A(C_r) / n_s \right]$ で近似できる。
- 以上の手順を $r=1, \dots, n$ に対しておこなえば、分配関数 Z を $J/k_B T$ についてモーメント

展開したときの第 n 項までの展開係数の近似値がえられる。分配関数 Z の第 n 近似式がえられたのであるから、これより導き出せる熱力学的諸量が容易に得られる。本方法を $N=10$ 、1次元輪系に適用した結果⁶⁾が第I表である。BonnerとFisher⁷⁾のものと比較してみるとその一致はきわめてよい。これにより本方法の有効性が分かったので、更に2次元系に適用し、その解析を進めている。また、反強磁性体への適用は $J < 0$ に基づく分配関数のモーメント展開時の負符号の問題がきびしいがこれもアルゴリズムを改良して実用化を計りつつある。

表 I

$k_B T/J$	$-E/NJ$	C_H/Nk_B	$\chi_0 J/N \mu^2$
5.0	.13324 (.13325)	.02309 (.02309)	.23954 (.23954)
4.0	.16097 (.16098)	.03325 (.03326)	.31143 (.31143)
3.0	.20227 (.20228)	.05110 (.05111)	.44131 (.44130)
2.0	.26814 (.26816)	.08387 (.08388)	.73652 (.72651)
1.0	.37546 (.37548)	.12976 (.12969)	1.8687 (1.8685)
0.9	.38859 (.38861)	.13281 (.13270)	2.1650 (2.1649)
0.8	.40200 (.40200)	.13531 (.13509)	2.5565 (2.5563)
0.7	.41564 (.41561)	.13756 (.13713)	3.0927 (3.0924)
0.6	.42951 (.42943)	.13985 (.13945)	3.8613 (3.8610)
0.5	.44361 (.44355)	.14229 (.14305)	5.0303 (5.0306)
0.4	.45808 (.45811)	.14780 (.14846)	6.9539 (6.9548)
0.3	.47317 (.47320)	.15263 (.15229)	10.470 (10.469)
0.2	.48797 (.48797)	.13657 (.13723)	17.922 (17.919)

()内はBonnerおよびFisher⁷⁾による方法での再計算値
M.C.においては、 $N=10$, $n=100$, $n_s=10^6$ のときの数値結果

- 1) D.C.Handscomd, Proc.Camb.Phil.Soc.58(1962),594;60(1964),115.
- 2) J.W.Lyklema, Phys.Rev.Lett.49(1982),88; Phys.Rev.B27(1983),3108.
- 3) M.Suzuki, Comm.Math.Phys.51(1976),183; Prog.Theor.Phys.56(1976),1454.
M.Suzuki,S.Miyashita and A.Kuroda, Prog.Theo.Phys.58(1977),1377.
- 4) S.Homma,H.Matsuda and N.Ogita,Prog.Theor.Phys.72(1984),1245.
- 5) M.Hamermesh, Group Theory and its Application to Physical Problem
(Addison-Wesley,1964).
- 6) S.Kadowaki and A.Ueda, Prog.Theor.Phys.75(1986).
- 7) J.C.Bonner and M.E.Fisher, Phys.Rev.A135(1964),640.