

反強磁性的三角格子のモンテカルロシミュレーション

名大・理 佐野和博
 名大・工 本間重雄
 九大・理 松田博嗣
 理研 荻田直史

我々は量子多体系に対するモンテカルロシミュレーションの一方法として 'Decoupled Cell Method' (DCM と略記) を提案し、これを一次元XY-模型 ($S = 1/2$) に適用し、種々の有意義な結果を得、この方法が量子系のシミュレーション法として有用であることを確かめた。¹⁾ このDCMを高次元の量子系に用いることは容易であり、そこで最近話題となっている反強磁性的三角格子 (AF T と略記) に応用する事を試みている。以下はその途中経過の報告である。先ず DCM の概略を述べる。

話を具体的にすため、次の Hamiltonian で与えられる系を取り上げる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (J_z \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z + J_{\perp} (\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_j^y)) - H \cdot \sum_i \hat{\sigma}_i^z \quad (1)$$

ここに $\hat{\sigma}_i = (\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^y, \hat{\sigma}_i^z)$ はパウリのスピン演算子、 J_z, J_{\perp} は交換相互作用であり正の量である。演算子 $\hat{\sigma}_i$ の対角表現 $\hat{\sigma}_i$ の方向は、この方向と $\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^y, \hat{\sigma}_i^z$ とのなる方向余弦を l, m, n とすれば

$$\hat{\sigma}_i = l \hat{\sigma}_i^x + m \hat{\sigma}_i^y + n \hat{\sigma}_i^z \quad (2)$$

の様に書ける。例えば $\hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ の様にすれば $l = m = 0, n = 1$ となる。 $\hat{\sigma}_i$ の固有値は ± 1 である。

任意の格子点 i に着目し、この格子点上の演算子 $\hat{\sigma}_i$ の固有値を σ とする。 $\sigma \in \{\pm 1\}$ 。この格子点 i を中心として i を含んだ任意の大きさの cell $L_i^{(0)}$ を考える。 ν は cell $L_i^{(0)}$ に含まれる格子点の総数を表わす。cell $L_i^{(0)}$ を除いた系の残りの部分を \bar{L}_i と名付ける。更に、cell $L_i^{(0)}$ のスピン状態を $S_i^{(0)}$ 、残りの部分 \bar{L}_i のスピン状態を \bar{S}_i とすると、系全体のスピン状態は $(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ で表わせる。この状態に対するボルツマン分布は

$$P(S_i^{(0)}, \bar{S}_i) = Z^{-1} \langle S_i^{(0)}, \bar{S}_i | e^{-\beta H} | S_i^{(0)}, \bar{S}_i \rangle \quad (3)$$

である。ここに Z は系の分配函数、 $|S_i^{(0)}, \bar{S}_i\rangle$ は $(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ に対応する状態ベクトルである。ここで σ_i を σ から $-\sigma$ に変え、残る格子点のスピン状態を固定した状態 $(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ を考え $(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ と $(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ との存在比を次式で定義する。

$$\xi(S_i^{(0)}, \bar{S}_i) = P(S_i^{(0)}, \bar{S}_i) / P(S_i^{(0)}, \bar{S}_i) \quad (4)$$

状態 $(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ から $(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ への遷移確率 $W(S_i^{(0)}, \bar{S}_i)$ が熱平衡において詳細釣り合いが成り立つ様に

$$W(S_i^\sigma, \bar{S}_i) = \begin{cases} g(S_i^\sigma, \bar{S}_i) & , (g(S_i^\sigma, \bar{S}_i) < 1) \\ 1 & , (g(S_i^\sigma, \bar{S}_i) \geq 1) \end{cases} \quad (5)$$

を与えるとこれに従うマルコフ鎖の時系列によりカノニカル集合が求められ、種々の熱力学量が求められる。従って如何にして $g(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$ を量子力学的に求めるかが問題となる。ここで我々は次の推論を行なう。

「 $g(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$ の \bar{S}_i 依存性は cell $L_i^{(v)}$ を大きくするにつれ減少する」 (A)

推論 (A) により g を計算する。部分系 $L_i^{(v)}$ (これが decoupled cell である。) の Hamiltonian $H_i^{(v)}$ を (1) の H の代りに用い $g(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$ を次式で近似する。

$$g(S_i^\sigma) = \frac{\langle S_i^\sigma | \exp(-\beta H_i^{(v)}) | S_i^\sigma \rangle}{\langle S_i^\sigma | \exp(-\beta H_i^{(v)}) | S_i^\sigma \rangle} \quad (6)$$

この $g(S_i^\sigma)$ を (5) に用い $W(S_i^\sigma, \bar{S}_i)$ を $W(S_i^\sigma)$ で近似してマルコフ鎖を作るのである。これが DCM によるモンテカルロシミュレーションの概要である。(6) の評価は計算機で $H_i^{(v)}$ の固有値問題を解けば容易に実行出来る。実際のシミュレーションは $W(S_i^\sigma)$ を用いメトロポリス法を援用すればよい。DCM を用いて次の物理量を観測する。

(1) 内部エネルギー - $E = E/N = N^{-1} \langle H \rangle$, N は格子点数

(2) 比熱 $C = (Nk_B T^2)^{-1} \langle (H - E)^2 \rangle$

(3) 磁化 $m = M/N = N^{-1} \langle \sum_i \sigma_i \rangle$

(4) 帯磁率

$$\chi = \begin{cases} (Nk_B T)^{-1} \langle (\sum_i \sigma_i - M)^2 \rangle & [\sum_i \hat{\sigma}_i, H] = 0 \\ \lim_{H \rightarrow 0} (m/H) & [\sum_i \hat{\sigma}_i, H] \neq 0 \end{cases}$$

(5) 相関関数

$$S(r) = \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle$$

$$T(t) = \langle \sigma_i(t=0) \sigma_i(t=t) \rangle$$

系に応じてパラメータ J_z, J_\perp , 外磁場 H , cell の大きさ v , 格子点の総数 N を変え、シミュレーションを実行すれば、その系の熱力学的性質がわかることになる。この方法 (DCM) の限界ほどのサイズの cell まで $H_i^{(v)}$ の固有値問題を計算機で解き得るかに依存している。

研究会報告

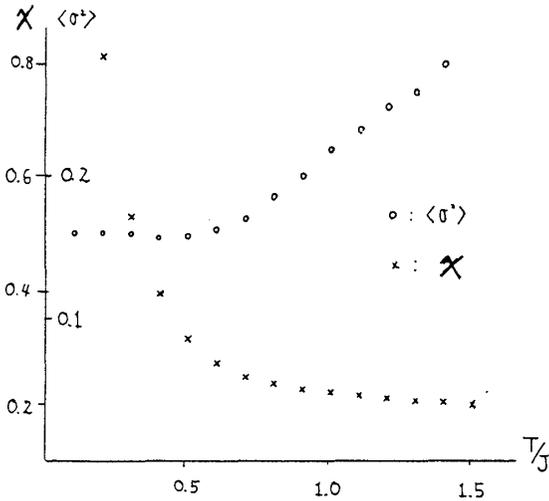
AFTのシミュレーションに際して我々が用いた decoupled cell の大きさは $\nu=7$



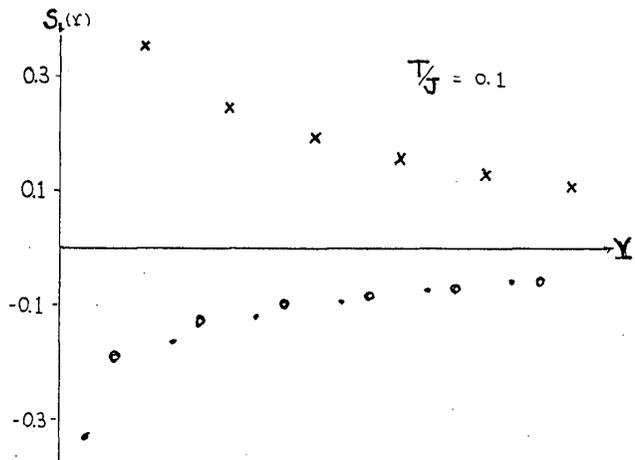
従って $Z^7 = 128 \times 128$ の行列を対角化することになる。 cell の中心の site (i) が 遷移に参与する格子点となる。

これまでのシミュレーションで得られた結果を示しておく。

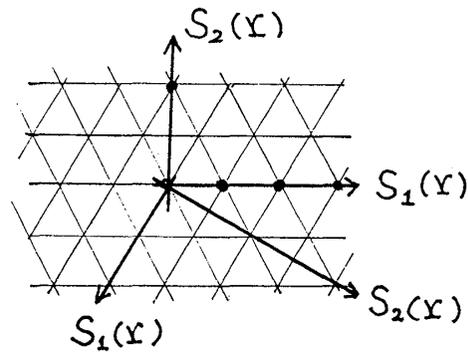
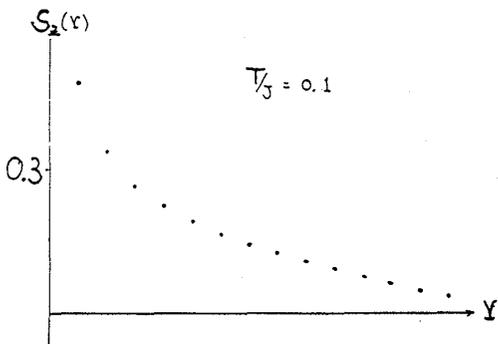
図・1



図・2



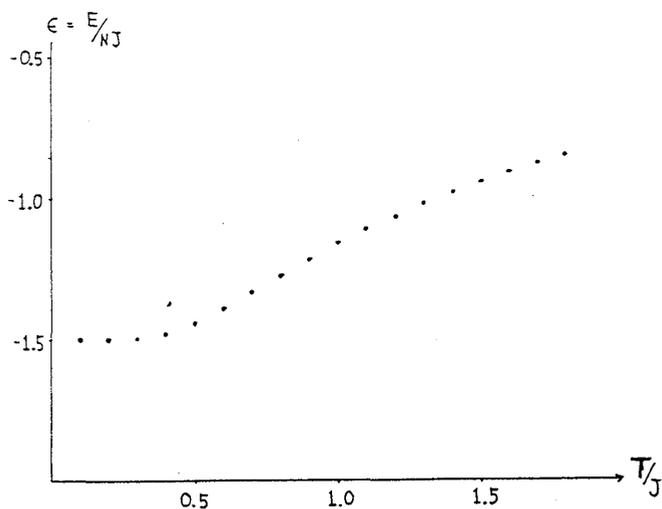
図・3



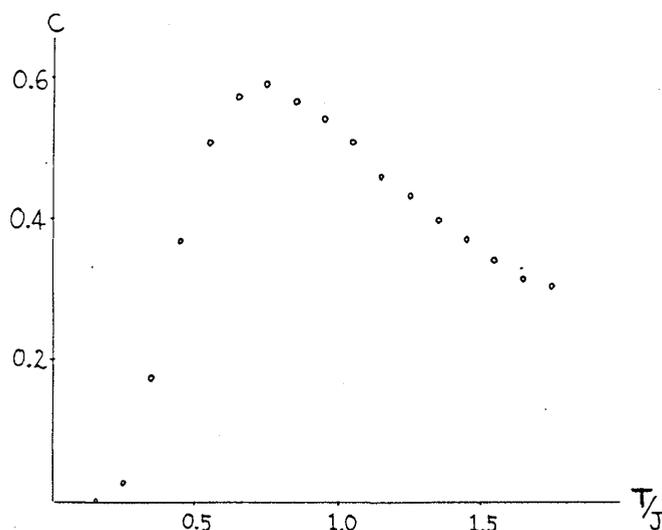
図・1, 2, 3 は各々 Ising 模型の X 及び $\langle \sigma^2 \rangle$, 相関関数 $S_1(r)$, $S_2(r)$ を示す。 $S_1(r)$, $S_2(r)$ の意味は右下図に示してある。 この結果, AFT Ising 模型は (i) $T \rightarrow 0$ で X は発散する。 (ii) 低温領域では Wannier が指摘した部分格子構造をとる事を示している。²⁾ 更に $T(t)$ におするシミュレーションも実行した。 この結果

$T(t)$ は T が増すと零に近づき, 低温では ν , 高温では病数関数型の減衰を示した。 このことは AFT Ising 模型の基底状態はガウス状態ではなく, Wannier が指摘した2つのエネルギー最低状態を行きつ戻りつした状態に陥ることを示すものといえよう。

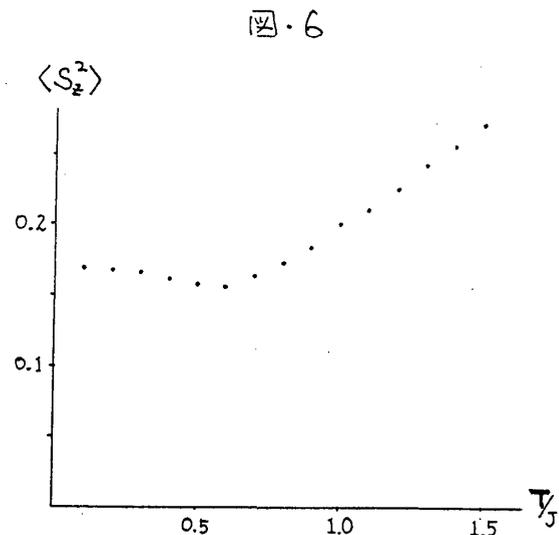
次に Isotropic Heisenberg 模型で得た結果を図・4, 5, 6 に示す。 図・4 は格子点当りの内部エネルギー, 図・5 は比熱, 図・7 は $\langle (S^z)^2 \rangle$ の, 各々温度依存性を表わしたものである。



図・4



図・5



図・6

基本的な様子は Ising 模型の場合と類似している。内部エネルギー $-E$ について、 $T/J \leq 0.5$ では $|E(\text{Heisenberg})| \approx 3|E(\text{Ising})|$ であるがこれより上の温度では $|E(H)| > 3|E(I)|$ が常に観測された。つまり、量子効果はスピンの ordering を助長している。このことは $S_x(r), S_z(r)$ の観測でも確認された。図・6で $T \rightarrow 0$ での $\langle S_z^2 \rangle$ が有限に残ること、AFT Heisenberg 模型に対する Anderson の予言との関係は今後の課題として検討したい。

文献

- 1) S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita, Prog. Theor. Phys. 72 (1984) 1245
- 2) G.H. Wannier, Phys. Rev. 79 (1950), 357