# 2次元三角格子上の量子ハイゼンベルクモデルのモンテカルロシミュレーション

東大・理　高須 昌子，宮下 精二，鈴木 増雄

## 1．はじめに

2次元三角格子上の量子ハイゼンベルクモデルに関しては，P.W. Andersonが，基底状態がネール状態でなく，singlet pairs の resonating valence bonds になっていると言い出して以来，多くの研究がなされてきた。[2)-10)] 特に最近では，厳密な数値的対角化による研究，[5),6)] 温度量子場のダイナミックスによる研究[7)]も進み，また，実験の方面でも，$NaTiO_2$[9)]を中心に，このモデルの性質が調べられている。我々は，このモデルを，2章で述べるような，量子モンテカルロの方法を用いて調べる。

## 2．方法論

量子系のモンテカルロ計算は，比較的古くから行なわれており，いろいろな系に応用されている。様々な種類の**量子モンテカルロ法**については，文献11）の解説記事に詳しい。我々は，鈴木[12)]によって示された，次のような拡張されたトロッター公式を用いる：

$$e^{-\beta\mathcal{H}} \underset{n\to\infty}{\sim} \left[ \prod_j e^{-\beta\mathcal{H}_j/n} \right]^n \tag{1}$$

ここで，ハミルトニアン$\mathcal{H}$を局所的なハミルトニアン$\{\mathcal{H}_j\}$に分解した：

$$\mathcal{H} = \sum_j \mathcal{H}_j \tag{2}$$

一般に，$e^{-\beta\mathcal{H}}$の行列要素を求めることは困難であるが，局所的なハミルトニアン$\mathcal{H}_j$については，$\exp(-\beta\mathcal{H}_j/n)$の行列要素を求めることが可能である。我々が考えている三角格子の場合，図1のような，4スピンのクラスターを，局所ハミルトニアンとしてとる。すなわち，

$$\mathcal{H}_i = -\frac{J}{2}(\sigma_a\sigma_b + \sigma_a\sigma_c + \sigma_b\sigma_d + \sigma_d\sigma_c) - J\sigma_b\sigma_c \tag{3}$$

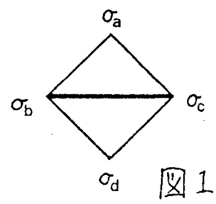



図1

また，モンテカルロ・フリップは，図2のような3種類をとる；

（a）グローバルフリップ … 磁化 $M=\sum_i \sigma_i^z/2$ を変化させる。

（b）ローカル・フリップ ｝磁化Mは不変のまま，局所的に

（c）ループ・フリップ　｝スピンをフリップさせ，量子効果をとり入れる。

これら3種類のフリップを考えることによって，エルゴード性が保証される。つまり，無限大の時間をかけたとき，許される全ての配位が，原理的には実現される。

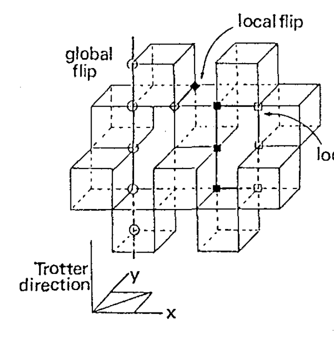



図2

## 3. 結果と考察

まずはじめに，強磁性のハイゼンベルクモデルの場合について，計算を行なった。その結果を，図3～図5に示す。トロッター数$n$に関する規則性を，例えば比熱について調べると，図6のように，$1/n^2$で収束する[13]ことがわかる。厳密な量子系の結果は，$n\to\infty$の極限で得られるが，$n$があまり大きくないところでも，このように規則性がある場合，$n\to\infty$の値を外挿できる。

一方，三角格子上の反強磁性体の場合は，フラストレーション系特有の問題がある。(1)式のようなトロッター分解を行なったときの局所的なボルツマン因子の行列要素が，反強磁性体の場合，正または負をとりうる。正方格子のような，フラストレートしていない系では，(1)式の積の中にあらわれる負の項は偶数個であるから，全体として正となり，問題はないが，今考えている三角格子のようなフラストレートした系では，系全体のボルツマン因子の行列要素が負となりえる。そのような，負の行列要素を持つ配位の一例を，図7にあげた。

図3

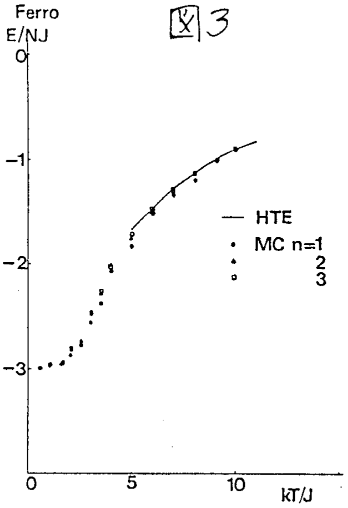



図4

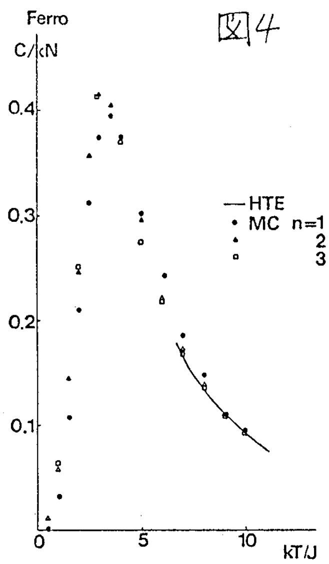



図5

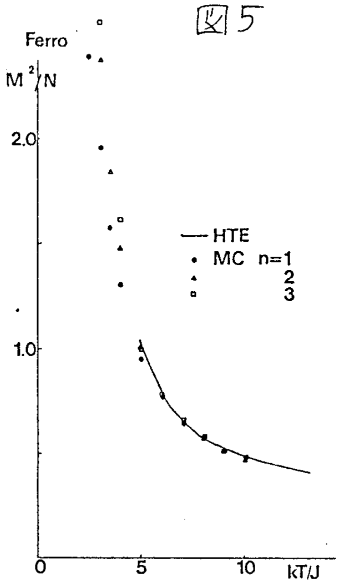



図6

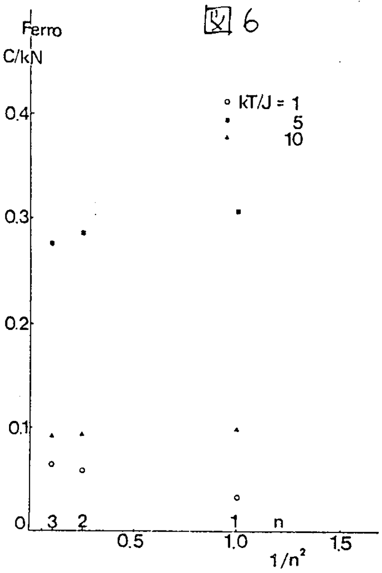
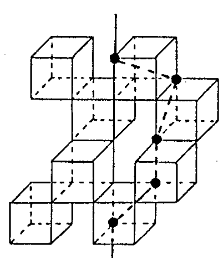



図7



●は下向きのスピンをあらわしている。

このような系では，ある物理量Aの期待値は次の式で求められる：

$$\langle A\rangle = \frac{A_+ - A_-}{Z_+ - Z_-} \qquad (4)$$

ここで，$Z_+$, $Z_-$ は，正または負のボルツマン因子をとるサンプル数であり，$A_+$, $A_-$ は，それらの空間での物理量Aの和である。

実際の系で，負符号の割合である $Z_-/(Z_+ + Z_-)$ の温度依存性を計算したものを，図8（4個のスピン）と，図9（36個のスピン）にあげてある。これらからわかるように，温度が下がるほど $Z_-$ の比率は大きくなり，また，格子が大きくなるほどこの傾向は顕著になる。低温でかつ系が大きくなると，(4)式の分母は0に近い量となり，非常に精度の悪い計算をしていることになる。意味のある値を得るには，

$$MCS \sim \overline{MCS} \times \frac{Z_+ + Z_-}{Z_+ - Z_-} \qquad (5)$$

程度かかる。但し，$\overline{MCS}$ は，$A_+$ または $A_-$ が収束するまでにかかるモンテカルロステップ数である。［このような負符号問題は，Villain格子（フラストレートした正方格子）の $n=1$ の場合については解決されている[14]が，三角格子については未解決である。］

以上のような事情に注意して，36個の反強磁性スピンについて，モンテカルロシミュレーションを行ない，図10，11，12のように，エネルギー，磁化 $\langle M^2\rangle$，副格子磁化 $\langle M_A^2\rangle$ （$M_A = \sum_{i\in A} \sigma_i^z/2$，Aは3つの副格子の1つ）を求めた。

図8

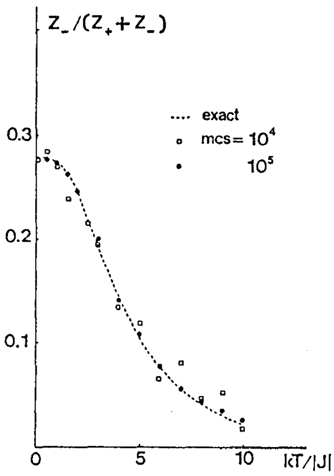



図9

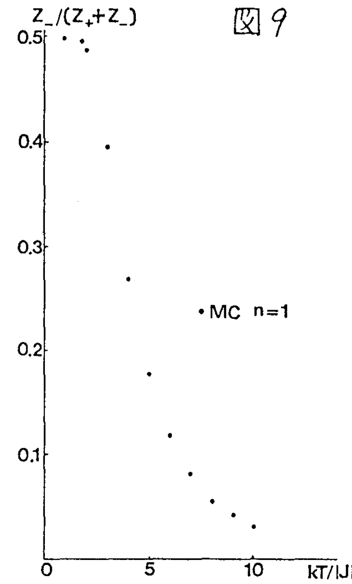



図10

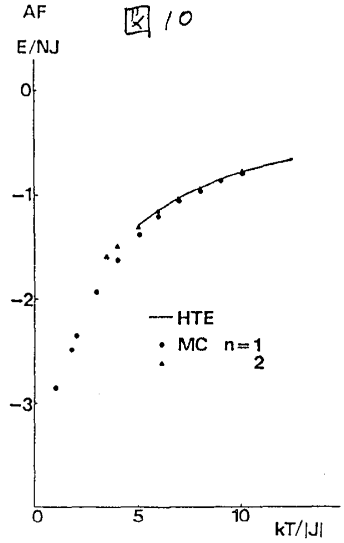



図11

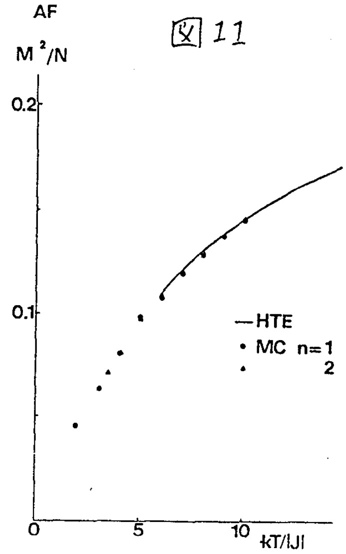
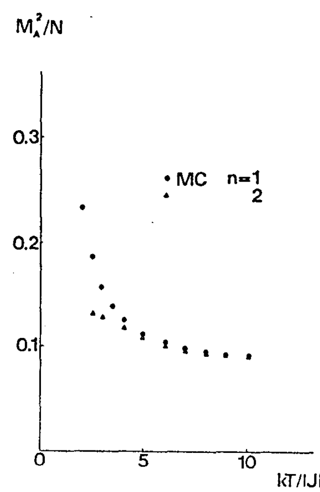



図12



これらは，高温側では，Bakerらの高温展開[15]と一致している。磁化 $\langle M^2\rangle$ の温度依存性をみると，低温になるにしたがって，一重項状態に落ち込んでいく様子がわかる。これは鈴木[7]による温度量子場の変分理論の結果と対応している。一方，副格子磁化 $\langle M_A^2\rangle$ は，温度を下げていくと上昇する傾向がみられ，トロッター数nが小さいときは，古典的な性質が残っていることがわかる。しかし，トロッター数nを増加させると，この傾向は弱くなり，量子系の場合，副格子磁化はよい秩序変数でないことを示している。

## 4. まとめ

以上述べてきたように，我々は三角格子上の量子ハイゼンベルクモデルの，強磁性の場合と，反強磁性の場合について，モンテカルロシミュレーションを行なった。負符号の問題によって，$T < |J|/k$ の温度範囲については，計算が困難であり，今後の新しい工夫が望まれる。

## 参考文献


1) P.W. Anderson : Mater. Res. Bull. 8 (1973) 153.

2) P. Fazekas and P.W. Anderson : Philos. Mag. 30 (1974) 423.

3) L.G. Marland and D.D. Betts : Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1618.

4) S. Miyashita : J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 44.

5) T. Oguchi, H. Nishimori and Y. Taguchi : J. Phys. Soc. Jpn (1986)

6) S. Fujiki and D.D. Betts : private communication.

7) M. Suzuki : J. Stat. Phys. 42 (1986) Nos 5/6, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 4483, 及びこの研究会報告.

8) D.H. Lee, J.D. Jannopoulos and J.W. Negele : Phys. Rev. B30 (1984) 1599.

9) K. Hirakawa, H. Kadowaki, K. Ubukoshi : J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3526,
I. Yamada, K. Ubukoshi, K. Hirakawa : ibid, 54 (1985) 3571.

10) M. Takasu, S. Miyashita, M. Suzuki : submitted to Prog. Theor. Phys.

11) 鈴木増雄，宮下精二，高須昌子：量子系のモンテカルロ法（数理科学 1985.10月号）

12) M. Suzuki : Commun. Math. Phys. 51 (1976) 183, 57 (1977) 193; Prog. Theor. Phys. 56 (1976) 1454;
Jour. Math. Phys. 26 (1985) 601; Phys. Rev. B31 (1985) 2975; J. Stat. Phys. (1986) in press.

13) M. Suzuki : Phys. Lett. 113A (1985) 299

14) T. Onogi, S. Miyashita and M. Suzuki : J. Stat. Phys. (1986)

15) G.S. Rushbrooke, G.A. Baker, Jr. and P.J. Wood : in Phase Transitions and Critical Phenomena Vol.3
ed. by C. Domb and M.S. Green (Academic Press, London, 1974) and references therein.

16) H. Kawamura and S. Miyashita : J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984).
S. Miyashita and H. Kawamura : ibid, 54 (1985) 3385.