

非平衡緩和法の量子臨界現象への応用

野々村 禎彦 <科学技術庁金属材料技術研究所, e-mail:nono@urim.go.jp>

1 はじめに：非平衡緩和法とは

モンテカルロ法は、多体系を統計力学的に扱う最も効率的な手法であり、臨界現象の研究にも広く用いられてきた。しかし、転移点の近傍で平衡状態のシミュレーションを行うと、臨界緩和と呼ばれる現象のために扱える系の大きさには限界があり、有限サイズ補正の評価が解析を複雑にしていた。本稿では、これらの困難を克服した非平衡緩和法 [1, 2] という一般的な方法を紹介し、量子臨界現象研究への拡張法 [3, 2] を説明する。

この方法を図式化したのが図1である。完全秩序状態から磁化のモンテカルロシミュレーションを始めると、無秩序相では磁化が指数関数的に減衰し、秩序相では有限に残るのに対し、転移点の直上のみで冪的な減衰が起こる。この減衰の様子から系の転移点が求められ、さらに減衰の指数から臨界指数が評価できる。以下で説明するように、十分大きな系を取れば、測定を行う範囲では無限系の振舞と一致するので、有限サイズ補正は考慮する必要がない。また、原理的に平衡化が不要なので、計算機のメモリーに収まる限りは、いくらでも大きな系が扱える。1サンプルの計算時間は系の体積に比例するが、系が大きくなるとゆらぎが小さくなり、サンプル平均の個数が少なくて済むので、大きな系を用いても総計算時間は増えない。

2 非平衡緩和法の導出

この方法の定式化の出発点は、鈴木の動的有限サイズスケーリング理論 [4]：

$$m(g, L, t) = L^{-\beta/\nu} f_{sc} \left[(g - g_c) L^{1/\nu}, t L^{-\Delta} \right] \quad (1)$$

である。ただし、 g は臨界現象を特徴付けるパラメータ（温度、相互作用の強さなど）、 L は系の1辺の長さ、 t はモンテカルロステップ数、 g_c は転移点、 β は自発磁化の臨界指数、 ν は相関長の臨界指数、 Δ は動的臨界指数である。この式には β , ν , g_c , Δ の4つの自由パラメータが含まれているので、以下のような手順を踏んで効率的な解析を行う。

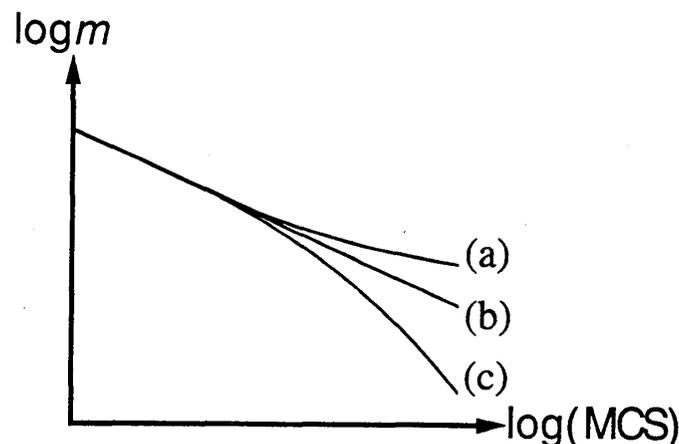


図1: 非平衡緩和法概念図。完全秩序状態から出発して、自発磁化をモンテカルロステップ数に対して両対数プロットした時の、(a) 秩序相、(b) 転移点、(c) 無秩序相での振舞。

まず、転移点直上にある無限に大きな系では、式(1)は以下のように簡略化される [5]:

$$m(g_c, t) \sim t^{-\lambda}, \quad \lambda = \beta/(\Delta\nu) \quad (2)$$

転移点 g_c は自発磁化が冪的に緩和する点として決まり、同時に複合指数 λ も求められる。この方法は、転移点や静的臨界指数がよく知られた系の動的臨界指数を求める方法として用いられてきたが、臨界現象がよく知られていない系に応用された [1] のは最近である。

式(2)だけでは、未知の臨界現象を調べる道具としては十分ではない。そこで、一般の g における無限に大きな系の振舞を考えると、式(1)は以下のような形になる [6]:

$$m(g, t) = t^{-\lambda} f_{sc} [(g - g_c)t^\mu], \quad \mu = 1/(\Delta\nu) \quad (3)$$

この式に現れる複合指数 μ と式(2)から求められる複合指数 λ の間には $\beta = \lambda/\mu$ という関係があるので、自発磁化の臨界指数 β は非平衡緩和のデータのみを用いて求められる。また、転移点直上にある有限の大きさの系では、式(1)は以下のように書かれる [7]:

$$m(g_c, L, t) = L^{-\beta/\nu} f_{sc} (tL^{-\Delta}) \quad (4)$$

これより動的臨界指数 Δ が求められ、また相関長の臨界指数 ν は $\nu = \Delta/\mu$ で与えられる。

式(4)は、非平衡緩和法における有限サイズ効果の現れ方を示している。出発点の完全秩序状態には、無限系と有限系の違いはない。緩和が始まると、徐々に無秩序な島が成長するが、島の大きさが系の大きさに比べて十分小さいうちは、まだ無限系の一部を取り出したものとみなせる。有限サイズ効果が見えてくるのは、島の大きさが系の大きさと同程度になった時で、それを特徴付けるのがクロスオーバー時間 $t^* \sim L^\Delta$ に他ならない。一様系の局所的なスピン更新では $\Delta \approx 2$ が期待され、十分大きな系を取れば無限系とみなせる計算が可能である。

3 量子臨界現象への応用

熱ゆらぎのエネルギースケールには下限はないが、量子ゆらぎにはプランクスケールという下限があるので、有限温度量子系の普遍性は同じ対称性を持つ古典系と同じになる。従って、統計力学的な観点から非平衡緩和法の応用対象として興味深いのは、熱ゆらぎが存在しない基底状態で、量子ゆらぎの強さを変化させた時に起こる「量子臨界現象」である。

非平衡緩和法と量子モンテカルロ法 [8] を組み合わせることで、量子臨界現象が解析できる。量子モンテカルロ法で扱えるのはあくまで有限温度の系で、大きさ L^D 、逆温度 $\beta = 1/(k_B T)$ の量子系が、大きさ $L^D \times \beta$ (一般には、虚時間方向と実空間方向の相関長の減衰率の比を表す指数 z を用いて $L^D \times \beta^z$ となるが、一様系では $z = 1$) の古典系に射影される。平衡系の計算では、温度をギャップよりも十分低くしないと有限温度の振舞が見えてしまうが、非平衡緩和法では、シミュレーション温度の違いはクロスオーバー時間の違いに帰着し、十分大きな系で $\beta \approx L$ に取れば、無限系の量子臨界現象が調べられる。この方法論は非常に一般的で、原理的には任意の量子モンテカルロ法のアルゴリズムと組み合わせることができる。

本稿では、世界線法と組み合わせた場合を紹介する。 Trotter 数を M とすると、 $\beta/M = \text{const.}$, $M/L^z = \text{const.}$ に固定しても、普遍性は元の量子臨界現象と変わらない。しかし、転移点は普遍量ではないので、一般には β/M の値に依存する。元の量子系の転移点を求めるには、複数の β/M に対する転移点の値を $\beta/M \rightarrow 0$ の極限に外挿する必要がある。一方、連続時間アルゴリズムと組み合わせれば、転移点は1組のシミュレーションで求められる。ただし、通常用いられるループアルゴリズムでは、転移点を正確に決めるには緩和が速すぎ、また秩序相でも指数関数的に緩和してしまうので、実際の応用には工夫が必要である。

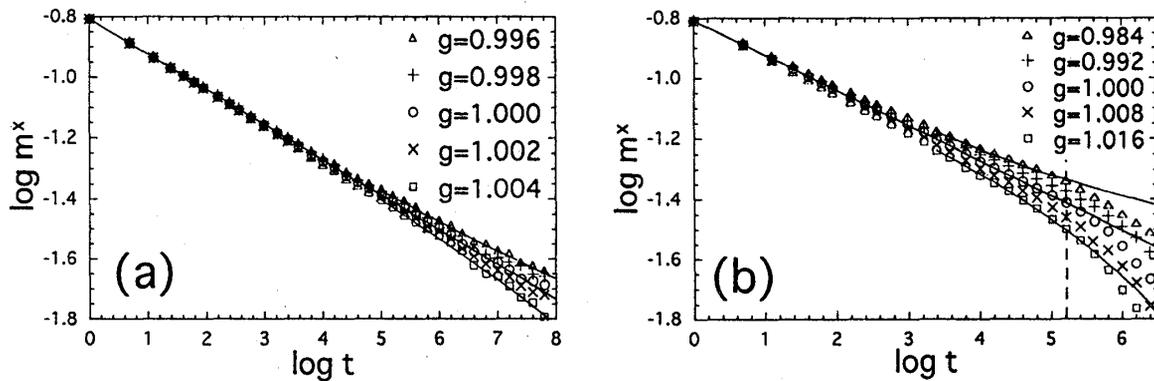


図 2: 1次元 $S = 1/2$ 非対称 XY モデルの x 方向の磁化の非平衡緩和。全スピンの x 方向に揃った状態からシミュレーションを開始した。(a) $L = 4096$, (b) $L = 64$ の系の計算結果。

4 応用例：1次元 $S = 1/2$ 非対称 XY モデル

具体的な応用例として、1次元 $S = 1/2$ 非対称 XY モデル：

$$\mathcal{H} = - \sum_i S_i^x S_{i+1}^x - g \sum_i S_i^y S_{i+1}^y, \quad S = 1/2 \quad (5)$$

の量子臨界現象への応用 [3, 6] を示す。このモデルの基底状態は、 $g > 1$ では y 方向に、 $g < 1$ では x 方向に自発磁化が生じるが、 x 方向の磁化を系の秩序変数だと思えば、 g を“温度”だと思えば、 $g_c = 1$ を転移点とする秩序-無秩序相転移に対応する。このモデルの臨界指数の厳密解 [9] は、 $\beta = 1/4$, $\nu = 1$ である。 $L = 4096$, $\beta/M = 1$, $2M/L = 1$ の結果を示すが、この系の転移点是对称性のみで決まるので、 $\beta/M \rightarrow 0$ への外挿は必要ない。

4.1 転移点の推定

まず、 x 方向の磁化の非平衡緩和の様子（1サンプルのみの結果）を示す（図 2a）。磁化とモンテカルロステップ数を両対数プロットすると、 $g = 1$ を境に、凹凸が明瞭に変化している。このわずか 3×10^3 ステップの計算（パソコンで数日程度）で、 $g_c = 1.000 \pm 0.002$ と評価できる。次に、クロスオーバー時間を見るために、 $L = 64$ の系の結果（4096 サンプルの平均）を示す（図 2b）。 $L = 64$ でも $t^* \approx 2 \times 10^2$ なので、 $L = 4096$ ではクロスオーバー時間は 10^6 のオーダーになり、このシミュレーションは無限系の振舞と同一視できる。

4.2 複合指数 λ の推定

計算の精度を上げるため 500 サンプルを平均し、各時刻で複合指数 λ を求めて $1/t$ に対してプロットしたのが図 3a である。非平衡緩和法の一般的な応用では、各時刻における値を $1/t$ で外挿して高次補正を除く解析が重要になる [1, 2] が、周期的境界条件を用いたこのシミュレーションでは、高次補正は無視できるほど小さく、時刻による指数のゆらぎが収まる範囲を推定値の誤差とみなす評価法で、 $\lambda = \beta/\Delta\nu = 0.1153 \pm 0.0005$ が得られた。厳密解と組み合わせると $\Delta = 2.168 \pm 0.010$ となり、この値は誤差の範囲内で 2次元イジングモデルの動的臨界指数 $\Delta = 2.165 \pm 0.010$ [10] と一致している。どちらも free fermion model ($\nu = 1$ は共通) だが、臨界指数 β は違うので普遍性は異なり、動的臨界指数の一致は自明ではない。

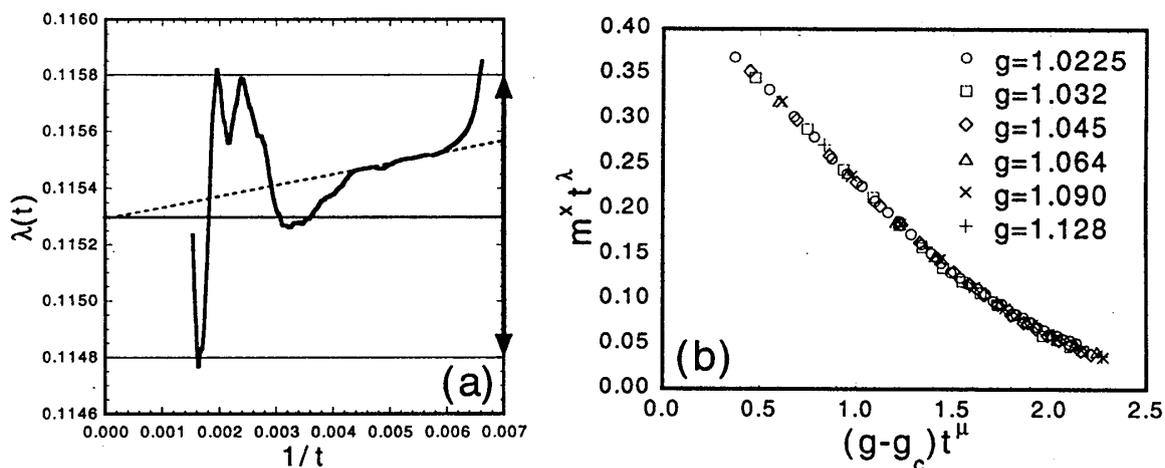


図 3: 1次元 $S = 1/2$ 非対称 XY モデルの (a) 転移点 $g_c = 1$ における指数 λ の時間依存性と、(b) 式 (3) による $g = 1.0225 \sim 1.128$ のデータを用いたスケーリングプロット。

4.3 臨界指数 β の直接推定

最後に、式 (3) を用いて臨界指数 β を直接評価する。 g_c と λ の値を用いて、さまざまな g に対する $(g - g_c)t^\mu$ を $m^x t^\lambda$ に対してプロットした時、同一曲線上に並ぶように μ を調節する。 $g = 1.0225 \sim 1.128$ のデータを用いたスケーリングプロット (図 3b) から得られた $\mu = 0.47 \pm 0.01$ ($\beta = \lambda/\mu = 0.245 \pm 0.005$) は、厳密解 $\beta = 0.25$ と良く一致している。

謝辞

本研究の一部は、理化学研究所基礎科学特別研究奨励費の援助による。数値計算は、東京大学物性研究所の FACOM VPP500 と、科学技術庁金属材料技術研究所の計算材料シミュレーター (NEC SX-4) で行った。有意義な助言を頂いた宮下精二教授に特に感謝したい。

参考文献

- [1] N. Ito, T. Matsuhisa and H. Kitatani: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1188.
- [2] 伊藤伸泰、尾関之康、野々村禎彦: 日本物理学会誌 **54** (1999) 336.
- [3] Y. Nonomura: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 5, J. Phys. A **31** (1998) 7939.
- [4] M. Suzuki: Phys. Lett. A **58** (1976) 435, Prog. Theor. Phys. **58** (1977) 1142.
- [5] N. Ito: Physica A **192** (1993) 604.
- [6] Y. Nonomura: preprint.
- [7] N. Ito and Y. Ozeki: private communication.
- [8] M. Suzuki: Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454.
- [9] B. M. McCoy: Phys. Rev. **173** (1968) 531.
- [10] N. Ito: Physica A **196** (1993) 591.