

スピン演算子に関して4次以上の項を含む 量子スピンモデルのモンテカルロシミュレーション

京都大学 情報学研究科 原田 健自¹, 東京都立大学 理学研究科 川島 直輝²

イントロダクション

量子スピン系に関する研究は $S = 1/2$ の場合がもっとも「量子性が強い」と期待されることから、この場合が主な研究の対象となってきたが、 $S = 1$ の1次元反強磁性ハイゼンベルクモデルにおける無秩序基底状態に代表されるように、近年は $S > 1/2$ の場合についてその量子力学的な効果を研究することが盛んになってきている。また、結晶場による磁気異方性の効果などを量子スピンモデルで考えようとした場合、それは、スピン演算子について一般に高い次数の項によって表されるが、そのような項が意味を持つのは $S > 1/2$ の場合においてである。つまり、異方性効果を正確に取り入れた計算を行うためには、大きなスピンに関する計算が必要になる。

量子スピン系に関する研究全般と同様に、量子モンテカルロ法もこれまでは $S = 1/2$ の場合に関する応用例が多かったが、ループ・クラスタアルゴリズム [1], およびその一般の大きさのスピンへの拡張 [2] によって、大きなスピンの系についても応用が多数報告されるようになってきている。その様な応用例として、2次元 $S = 1$ 反強磁性ハイゼンベルクモデルにおける、相関長の温度変化 [3], 1次元反強磁性ハイゼンベルクモデルにおいて、 S の値を変化させたときのギャップや相関長の変化 [4], 様々な S の値に関する2次元ランダム希釈反強磁性ハイゼンベルクモデルにおける臨界濃度およびその近傍の研究 [5] などがある。これらはすべてスピン演算子に関して双線形な場合だが、そうでない場合への応用としては、2, 3次元 bilinear-biquadratic モデルの相図および有限温度臨界現象の研究 [6] などがある。

以下では、まずスピンに関して高い次数の項が含まれる場合もそうでない場合にも共通に使えるモンテカルロ法の枠組みについて説明し、最後にその具体例のいくつかを示す。

向き付きループアルゴリズム

ループ・クラスタアルゴリズムはそれまでの量子モンテカルロシミュレーションにあったエルゴード性の問題や、臨界点付近での遅い緩和など諸問題を解決する強力な手法であったが、外場が存在するときには著しく非効率になることが分かっていた。この問題を世界線の不連続性を一時的に許すことによって解決する方法が提案された [7]。この方法においては、時空内に2箇所、世界線が不連続になる箇所（ワーム）をつくり、このワームが時空内を動き回ることによって状態を更新する。このワームアルゴリズムは外場のかかった問題に関してはループ・クラスタアルゴリズムに比べて優れていたが、臨界点付

¹E-mail:harada@acs.i.kyoto-u.ac.jp

²E-mail:nao@phys.metro-u.ac.jp

近での遅い緩和に対しては、ループ・クラスタアルゴリズムのような劇的な緩和時間の短縮はみられない。最近 Syljuåsen と Sandvik [8] はこの両者を統一的に扱う一般論を提案して、これに基づくアルゴリズムを向き付きループアルゴリズム (directed-loop algorithm) と呼んだ。これは外場がある場合もない場合にも使え、外場がない場合にはループアルゴリズムと等価になり、外場がある場合にはワームアルゴリズムと同様な効率のよさを持っている。

彼らの提案は格子上の量子力学的なモデル一般に関するものであり、アルゴリズムを考える際の枠組みは与えてくれるが、個々のモデルに関して具体的なアルゴリズムが直ちに導かれるわけではない。与えられたモデルに対してこの枠組みにあてはまるアルゴリズムはユニークには決まらず、でたらめに選んだアルゴリズムはほとんどの場合使い物にならない。アルゴリズムの選び方として、彼ら自身が提案しているものとして「熱浴法的アルゴリズム」があるが、これも実際に用いてみると多くの場合にごく不満足な結果しか得られないものである（以下にその例を示す）。そこで我々は彼らの枠組みを用いて、任意のスピンの大きさをもつ XXZ モデルについて具体的でかつ有効なアルゴリズムを構成した。

我々の提案するアルゴリズムでは通常の世界線による量子モンテカルロ法と同様、全系は d 次元の離散実空間と 1 次元連続虚数時間の $(d+1)$ 次元時空内に表されている。以下便宜的に虚数時間方向を鉛直方向、実空間方向を水平方向と呼ぶことにする。各サイトは 1 本の鉛直方向の直線に対応する。（この直線をサイト線と呼ぶことにする。）また、時空内の各点 $x = (R, \tau)$ 上にはスピン変数 $m(x) = 0, 1, 2, \dots, 2S$ が定義されていて、 $S^z(x) = m(x) - S$ となっている。このとき、新しいアルゴリズムは以下のようなものになる。

1. 全系にバーテックスを発生させる。ここでバーテックスとは隣接するサイト線上にある同時刻の 2 点、 $x = (R, \tau)$ と $x' = (R', \tau)$ 、をつなぐ水平な線分である。バーテックスはスピンの状態に応じた確率密度 $\rho(m(x), m(x'))$ で確率的に発生される。
2. 時空内から一様ランダムに 1 点 x_0 を選び、そこにワーム対をおく。2 つのワームのうち動きまわるのは一方だけであり、他方は最初の位置から動かない。
3. 動くワームを確率 $m(x_0)/(2S)$ で負のワームとし、確率 $\bar{m}(x_0)/(2S)$ で正のワームとする。ここで $\bar{m} \equiv 2S - m$ であり、正（負）のワームとはスピンの値を 1 増やす（減らす）ワームである。すなわちある点を正のワームが通過すると、その点における m の値が 1 増える。
4. 動くワームをサイト線にそってバーテックスに当たるまで移動し、あたると散乱する。どの方向に散乱するかは確率的に決定される。その際の確率はバーテックスの直下、直上におけるスピン状態によってきまり、一般に $P(\Gamma|l', m'; l, m)$ とかける。ここで、 Γ は散乱の方向、 $l = m(R, \tau - \epsilon)$ 、 $l' = m(R, \tau + \epsilon)$ 、などである。この後もワームは移動と散乱を繰り返す。
5. 動くワームが動かないワームと同じ位置にきたとき、もし動くワームが正（負）のワームであれば、確率 $1/\bar{m}$ ($1/m$) で対消滅する。消滅しない場合は通過する。

XYZ モデル

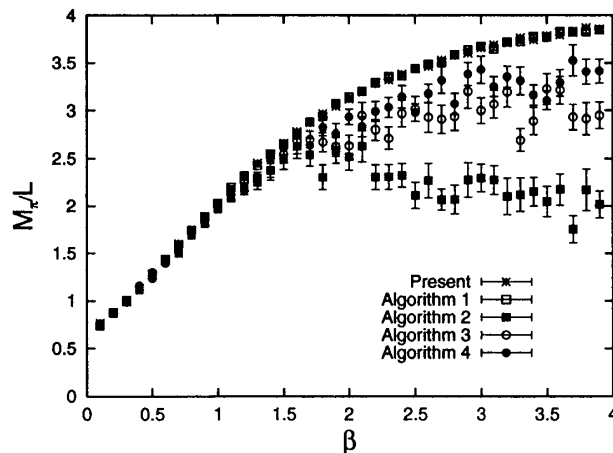


図 1: 1次元 $S = 1$ 反強磁性ハイゼンベルクモデルのスタガード磁化. システムサイズは $L = 64$. 磁場は 0. 各点は 1 セットをワームの対発生と対消滅の 2000 回反復として 50 セットの平均値を表す.

上で述べた手続きはほとんど Syljuåsen と Sandvik の提案した一般論そのままであり、肝心な部分は具体的なバーテックスの確率密度 $\rho(l, m)$, およびワームの散乱確率 $P(\Gamma|l', m'; l, m)$ なのであるが、これを一般の XXZ モデルに関して表にすると、1 ページ以上の紙面をとってしまうので、これは別の場所 [9] に譲ることにし、ここでは割愛する。重要な点は、スピン分割の方法によるシミュレーションを粗視化したものになるようにこれらの確率密度および確率が決められていることである。とくに磁場が 0 である場合には、従来から知られているスピン分割ループ・クラスタアルゴリズムによるシミュレーションを考え、これを粗視化したときに見えるものを、スピン分割を用いないで実行することに対応している。ここで、粗視化とは、分割されてできる個々のスピンに関する情報を捨てて、各時空点においてその合計値だけを見ることである。見方をかえているだけで、実際には同じことをしているのであるから磁場のない場合には従来のループ・クラスタアルゴリズムと同程度の効率の良さがあると期待できる。更に、磁場がある場合には自然にワーム型の状態更新に移行するので、ループ・クラスタアルゴリズムの時のように状態が凍りつくということはない。

我々の提案する粗視化されたスピン分割アルゴリズムと、他の向き付きループアルゴリズムを比較するために、 $S = 1$ 反強磁性ハイゼンベルクモデルに関してテスト計算を行った (図 1)。上述の様に向き付きループアルゴリズムはユニークには決まらないので、適当にいくつかを選んだ。そのうち 1 つ (図中の Algorithm 4) は Syljuåsen と Sandvik 自身が一般的なアルゴリズムとして提案している熱浴法アルゴリズムである。図中の Algorithm 1, 2, 3 はすべてワームアルゴリズムでは極力抑えるべきであるとされる turning-back 確率を最小化したものである。とくに Algorithm 1 は我々が試行錯誤したなかで見出した最善の解である。Algorithm 2, 3 および熱浴法アルゴリズムは低温では収束せず、これに対して Algorithm 1 および粗視化アルゴリズムはともに正しい値に収束した結果、互いに一致している。ここから分かることは、熱浴法的アルゴリズムやいい加減に選んだアルゴリズムはあまり役に立たないことと、粗視化アルゴリズムでなくても、うまくパラメータを選べば、効率のよいアルゴリズムを見出すことはできるということである。ただしうまくアルゴリズムを見つけるためには、問題に応じて試行錯誤をしなければならず、これは S が大きくなるとやっかいになる。

$SU(N)$ モデル

スピンの長さが大きいモデルでは、相互作用に高次の項を含めることで $SU(2)$ よりも高い対称性をもったモデルを考えることができる。一般にはスピンの場合 S の場合 $SU(2S+1)$ のモデルが構成できる。この場合、スピン分割表示におけるアルゴリズムはループアルゴリズムであって、強磁性、反強磁性の場合それぞれ単一種類のグラフで表される。具体的には強磁性の場合には $N-1$ 重のクロスで表されるグラフ、反強磁性の場合には $N-1$ 重の水平線で表されるグラフになる [9]。このスピン分割アルゴリズムを粗視化することで、計算時間および必要なメモリー量を少なくできるが、その結果のアルゴリズムは以下のように非常に簡単なものになる。バーテックス割り当て確率密度 ρ は全体の結合定数を J として、

$$\rho(l, m) = J\delta_{l, \bar{m}}$$

であり、散乱確率は横方向散乱（となりのサイトにとび移ってから入射方向とは虚数時間で逆向き方向に進む）確率が 1 でそれ以外の散乱確率は 0 である。我々はこのアルゴリズムを用いて $SU(N)$ モデルのテスト計算を行ったが、スピン分割によるもとのアルゴリズムより計算速度の点でもメモリー使用量の点でも優れていた。

まとめ

以上スピンが大きく磁場がある場合にも効率よくシミュレーションを行うための一般的な枠組みと、 XXZ モデルの場合の具体例を簡単に紹介した。スピンの大きい場合に意味をもってくる演算子に関して高次の項を含むモデルへの応用も期待されるが、その一例として $SU(N)$ モデルの場合のアルゴリズムを提案した。

参考文献

- [1] H. G. Evertz, M. Marcu and G. Lana: Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 875.
- [2] N. Kawashima and J. E. Gubernatis: Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 1295.
- [3] K. Harada, M. Troyer and N. Kawashima: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1130.
- [4] S. Todo and K. Kato: Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 47203.
- [5] K. Kato, et al: Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 4202.
- [6] Kenji Harada and Naoki Kawashima: Phys. Rev. B **65** (2002) 52403.
- [7] N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov and I. S. Tupitsyn: Pisma Zh. Eks. Teor. Fiz. **64** (1996) 853 [JETP Lett. **64** (1996) 911].
- [8] O. Syljuåsen and A. W. Sandvik: unpublished (cond-mat/0202316).
- [9] K. Harada and N. Kawashima: unpublished (cond-mat/0205472).