

2次元三角格子上の量子ハイゼンベルグモデルの 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グモデルに関しては, P.W.Andersonが, 基底状態が
ネール状態ではなく, 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 Trotter 公式を用いる:

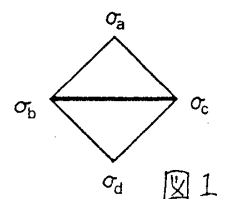
$$e^{-\beta H} \sim_{n \rightarrow \infty} \left[\prod_i e^{-\beta H_i/n} \right]^n \quad (1)$$

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

$$H = \sum_i H_i \quad (2)$$

一般に, $e^{-\beta H}$ 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 H_i に
ついては, $\exp(-\beta H_i/n)$ 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,

$$H_i = -\frac{J}{2} (\sigma_a \sigma_b + \sigma_a \sigma_c + \sigma_b \sigma_d + \sigma_c \sigma_d) - J \sigma_b \sigma_c \quad (3)$$



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,

量子効果を取り入れる。

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。

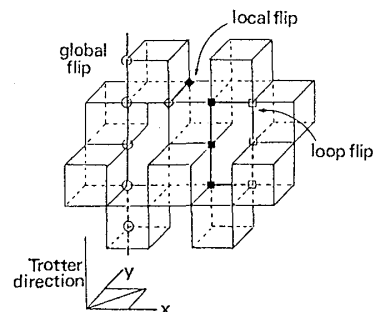
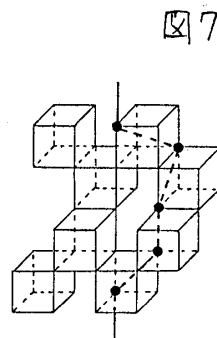
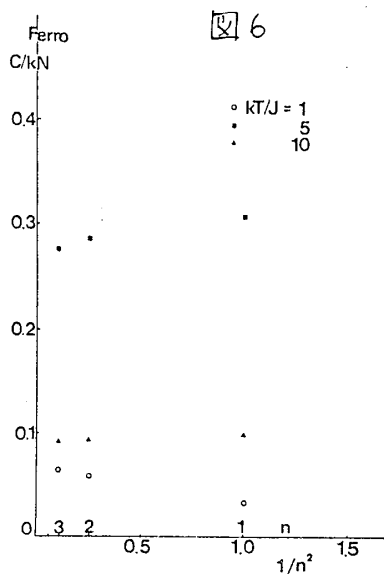
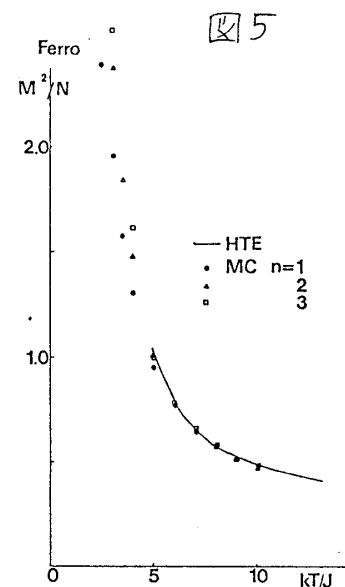
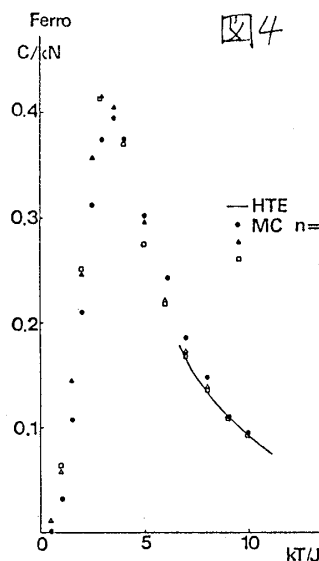
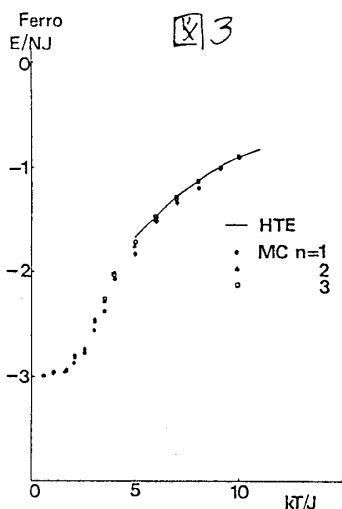


図2

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、 $n \rightarrow \infty$ 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、 $n \rightarrow \infty$ 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、フラストレーションしていない系では、(1)式の積の中にあら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ションした系では、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。



●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：

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

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リ
数であり、 A_+, A_- は、それらの空
間での物理量Aの和である。

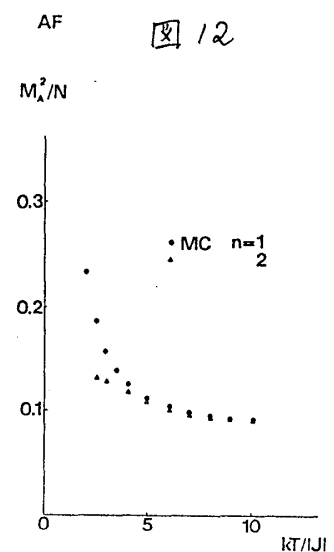
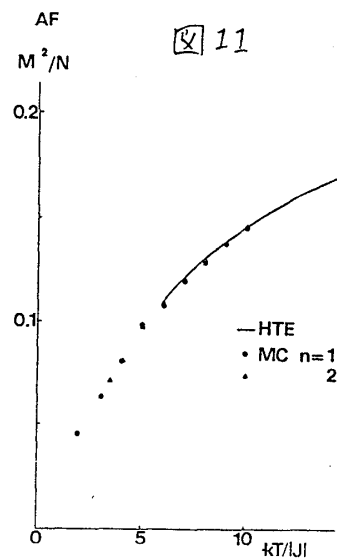
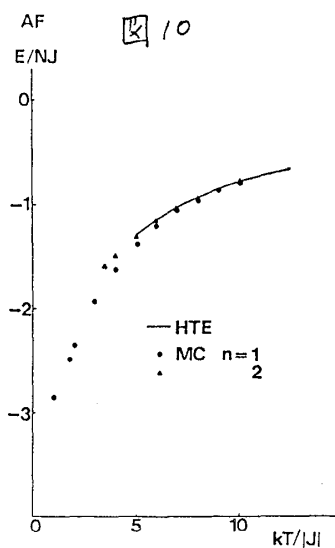
実際の系で、負符号の割合である
 $Z_-/(Z_+ + Z_-)$ の温度依存性を計算した
ものを、図8(4個のスピン)と、
図9(36個のスピン)にあててある。
これらからわかるように、温度が

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、

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

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 $\langle M_A^2 \rangle$
($M_A = \sum_{i \in A} \sigma_i^2 / 2$, Aは3つの副格子の1つ)を求めた。



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グモデルの、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、 $T < 1/4$ 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: *Maten. Res. Bull.* 8 (1973) 153.
- 2) P. Fazekas and P.W. Anderson: *Philos. Mag.* 30 (1974) 423.
- 3) L.G. Markland 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 516, *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. B* 30 (1984) 1599.
- 9) K. Hirakawa, H. Kadonaki, 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 1985.10.98)
- 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. B* 31 (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.