

Quantum Monte Carlo method for magnetization process

阪大院 理学研究科 大西 弘明¹, 西野正理², 宮下 精二³

1 序

量子モンテカルロ法におけるループアルゴリズムは低温で緩和時間が短く有用である [1]。また、連続虚時間のアルゴリズムにより Trotter 外挿の必要もない [2]。しかし、低温高磁場では緩和時間が磁場に対して指数関数的に増大するため、必要な精度の数値計算が困難となる。それは、低温高磁場では系の磁化を変えるような状態遷移が起こる確率が非常に小さくなるためである。

そこで今回我々は、磁場下でのループアルゴリズムの改良を試み、通常のループアルゴリズムと従来の虚時間方向のグローバルフリップを結合させることにより、低温高磁場で有効なアルゴリズムを開発した [3]。

2 磁場下でのループアルゴリズム

$S = 1/2$ 1次元反強磁性ハイゼンベルグ模型を例として考える。

$$H = J \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - h \sum_{i=1}^N S_i^z$$

通常のループアルゴリズムでは、重み（ボルツマン因子）を磁場を含む部分とそれ以外の部分に分けて、磁場なしの重みでループを作り、磁場の重みでループフリップを行なう。磁化 $m (= 0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \dots)$ を持つループをフリップさせる確率は

$$p = \frac{\exp(-\beta m h)}{\exp(\beta m h) + \exp(-\beta m h)}$$

であり、低温高磁場では自己相関時間が指数関数的に増大する。このように、通常のループアルゴリズムが低温高磁場でうまく機能しない理由は、ループを作る重みに磁場が考慮されておらず、その重みで作られたループは磁場が小さいときには有効であるが、高磁場になるともはや有効でないためである。

¹ E-mail: onishi@spin.ess.sci.osaka-u.ac.jp

² E-mail: nishino@chem.sci.osaka-u.ac.jp

³ E-mail: miya@temp.ess.sci.osaka-u.ac.jp

そこで、磁場を取り入れた重みでループを作れば高磁場でも有効なループが得られると考えた。重みの方程式を、重みがスピン配位反転に対して非対称な場合に拡張し、磁場の重みを考慮したグラフの重みの解を見出した。この重みで作られた各ループは確率 $1/2$ でフリップさせることができる。しかし、各ループを独立にフリップさせたのでは詳細釣り合いが満たされなくなるため、いくつかのタイプのグラフが含まれるループのフリップが禁止される。高磁場ではフリップを禁止されたループの数が増大するために磁化を変化させる有効な状態遷移が行なわれなくなることが分かった。

このようにループアルゴリズムが高磁場でうまく働かないのは、磁化を変化させるループフリップの確率が非常に小さくなり、磁化について良い平衡状態が得られないためである。そこで、従来の量子モンテカルロ法で行なわれる虚時間方向のグローバルフリップをループアルゴリズムと結合させる方法を探った。これはそろったスピンを持つ虚時間方向にまっすぐの世界線を一齐にフリップさせるものである。スピンが全て磁場の方向にそろった状態を考えると、通常のループアルゴリズムにおいてもループとしてまっすぐそろった世界線が得られるため、遷移前後の状態はグローバルフリップを行なうのと同じである。ループフリップによるこの遷移の確率は

$$p = \frac{1}{e^{\beta h} + 1}$$

であるのに対して、グローバルフリップの場合は

$$p = \frac{1}{e^{\beta(h-J)} + 1}$$

となり、グローバルフリップの場合の方が磁化を変える遷移確率が大きくなる。このように、虚時間方向のグローバルフリップは高磁場で磁化を変化させる遷移として有効であることが分かる。この手法を試験的に $S = 1/2$ 1次元反強磁性ハイゼンベルグ模型に適用し、数値対角化の結果と比較したところ、良い精度で磁化過程を求めることが出来た。(図1) スピン3量体模型の磁化過程についても考察した。

$$H = \sum_{i=1, \text{step}3}^{N-2} [-J_F \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - J_F \mathbf{S}_{i+1} \cdot \mathbf{S}_{i+2} + J_{AF} \mathbf{S}_{i+2} \cdot \mathbf{S}_{i+3}] - h \sum_{i=1}^N S_i^z$$

この模型では Trotter 外挿が困難であるために磁化過程を求めるのは困難であることが指摘された [4]。連続虚時間のアルゴリズムでは Trotter 外挿の必要もなく、今回我々が開発した手法により低温高磁場において良い精度で磁化過程を求めることができた。(図2)

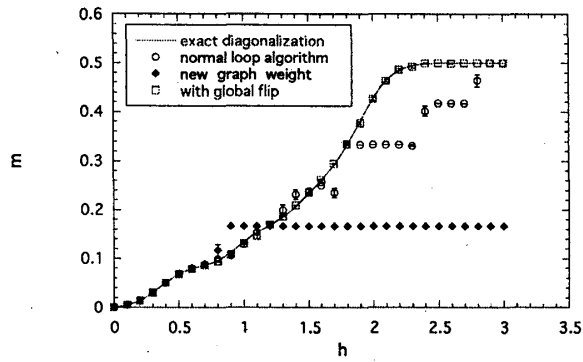


図 1: $S = 1/2$ 1次元反強磁性ハイゼンベルグ模型の磁化過程
 $N = 12, T/J = 0.1, 10^6$ MCS

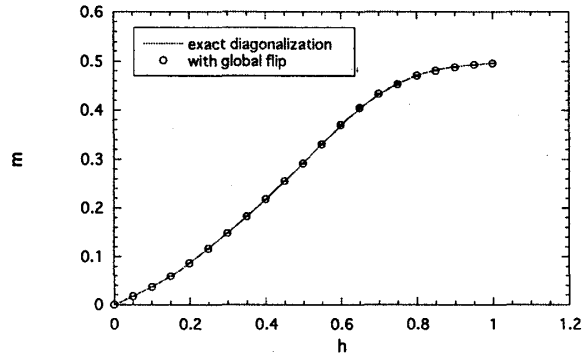


図 2: 3量体模型の磁化過程
 $N = 12, \gamma = 5, T/J_{AF} = 0.1, 10^6$ MCS

参考文献

- [1] N. Kawashima and J. E. Gubernatis: J. Stat. Phys. **90** (1995) 169 and reference therein;
 H. G. Evertz: cond-mat/9707221 (1997) and reference therein.
- [2] B. B. Beard and U. -J. Wiese: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 5130.
- [3] H. Onishi, M. Nishino, N. Kawashima and S. Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. in press, cond-mat/9903375.
- [4] M. Roji and S. Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1994.