

フラストレーションのある量子スピン系での負符号問題
～解決への第一歩～

東大・理 小野木敏之、宮下精二、鈴木増雄

§ I. 序

量子多体系をシミュレートする有力な方法として、鈴木によって提唱された量子モンテカルロ法がある。¹⁾ これは、一般化されたTrotter 公式²⁾に基いて、量子系を適当な古典系に系統的に近似し、そしてその古典系に対して通常のモンテカルロ・シミュレーションを適用することによって元の量子系の有限温度での種々の物理量を求めようとする方法である。この方法は最近多くの系に応用されて興味深い結果を生み出しているが、³⁾フラストレーションのあるような量子スピン系に対しては、負符号問題というモンテカルロ・シミュレーションにとって病的な問題が横たわりその適用を制限されている。本報告では、そのような系を上記の方法論の下その第一次近似内で扱い、負符号問題を回避できる例を示したい。⁴⁾

§ II. 量子モンテカルロ法における負符号問題とは

一般に、ある量子系 (Hamiltonian H) の分配関数は、Trotter 公式に従って

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \lim_{n \rightarrow \infty} Z_n \quad (1)$$

と書ける。ここで、 n 次近似体 $Z(n)$ は、Hamiltonian の適当な分割： $H = \sum_{i=1}^P H_i$ によって

$$Z_n = \text{Tr} \left[\prod_{i=1}^P e^{-\frac{\beta}{n} H_i} \right]^n \quad (2)$$

と定義する。(ただし、 n は Trotter 数である。) 式 (2) の右辺の積に、 $n P$ 個の状態の完全系を挿入すると、この近似体は古典的な分配和で表わすことができる。

$$Z_n = \sum_{\nu} W[\nu] ;$$

$$W[\nu] = \prod_{l=1}^n \langle \nu_l(1) | e^{-\frac{\beta}{n} H_1} | \nu_l(2) \rangle \langle \nu_l(2) | e^{-\frac{\beta}{n} H_2} | \nu_l(3) \rangle \cdots \langle \nu_l(l) | e^{-\frac{\beta}{n} H_P} | \nu_l(l+1) \rangle \quad (3)$$

と同様にして、物理量 Q の平均値も古典的に表現できる。^{1), 2)}

$$\langle Q \rangle = \text{Tr}(Q e^{-\beta H}) / Z = \sum_{\nu} Q[\nu] W[\nu] / \sum_{\nu} W[\nu] \quad (4)$$

これらの表式をもとに、 $W[\nu]$ なる確率で、状態 ν をモンテカルロサンプリングすれば求めたい物理量が得られる。

しかし、フラストレーションのある量子スピン系 (及び一次元を除く fermion 系) にこの方法を用いると、古典的な Boltzmann 因子に相当する $W[\nu]$ が状態によっては負になる場合が必ず生じる。このような負の確率を持った古典系を扱うときは、 $|W|$ なる確率で状態を取り出し

$$\langle Q \rangle = \sum_{\nu} Q \cdot \text{sign} W / \sum_{\nu} \text{sign} W \quad (5)$$

によって物理量の平均値を求めればよいが、このとき $+|W|$ をもつサンプルの数と $-|W|$ をもつそれとが、(6) 式の分母で打ち消し合い、測定値の精度が極端に悪くなるとい

う状況に出会う。これが負符号問題であり、シミュレーションにおいて、系のサイズを大きくとったり、低温側に移行するとともに深刻化し、十分な精度をあげるためには莫大なモンテカルロステップ数が必要となる。^{5), 6)} この困難を解決するための簡単な Anzatz が今田氏によって提出されたが、これは数学的には未証明であり、負符号問題は未だ解決されていないのが現状である。⁷⁾ 解決の方法としては、もし可能ならば、Trotter 公式によって近似された負の Boltzmann 因子を含む古典系を、正の因子のみを含む新しい古典系に厳密に変換することが考えられる。我々は、そのような変換が可能な例を、フラストレーションのある量子スピン系に対し、Trotter 数 $n = 1$ の場合に限り以下で示したい。

§ III. モデルと変換

正方格子 ($L \times L$) 上の量子 XYZ モデルを考え、系の Hamiltonian は、

$$\mathcal{H} = \sum_{b \in \langle ij \rangle} h_b \quad ; \quad -h_b = J_x(b) \sigma_i^x \sigma_j^x + J_y(b) \sigma_i^y \sigma_j^y + J_z(b) \sigma_i^z \sigma_j^z \quad (6)$$

とする。ただし、 $\{\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z\}$ は Pauli 行列であり、対相互作用 $\{J_x(b), J_y(b), J_z(b)\}$ の強さ及び符号は各 bond 毎に任意にとってよいとする。今この Hamiltonian を図 1 に示したように 4 種類の対 Hamiltonian に分割する。⁸⁾

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_4$$

$$(\mathcal{H}_1 = \sum_{b \in 1b} h_b, \mathcal{H}_2 = \sum_{b \in 2b} h_b, \dots) \quad (7)$$

一般論 (1) ~ (3) に従って、この分割の下、第 1 次近似体 ($n = 1$) に相当する古典スピン系を構成すると、4 体力で特徴づけられた checker-board 型の Ising 格子 ($2L \times 2L$) を得る。(図 2 参照。) ここで、4 体力は行列要素

$$\langle \sigma_i \sigma_j | e^{-\beta h_b} | \sigma'_i \sigma'_j \rangle = \quad \begin{array}{c} \sigma'_i \quad \sigma'_j \\ \begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array} \\ \sigma_i \quad \sigma_j \end{array} \quad (8)$$

から評価される。(以下の計算では便宜上 σ^x 表示をとった。)

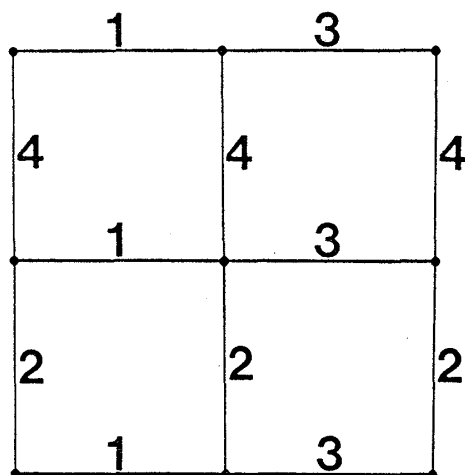


図 1. Hamiltonian の分割 (unit cell)

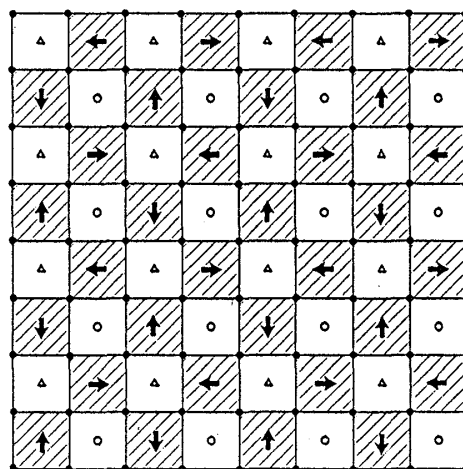


図 2. Ising 系 $\{\sigma\}$ ("●")

この Ising 系では、元の量子系にフラストレーションがあると、負の Boltzmann 因子をもった状態がでてくことに注意したい。我々の目的は、この系の負符号因子を解消することであるが、それは次に述べる 2 つの変換によって達成される。

まず新しい Ising spin 系 $\{\tau\}$ と $\{\mu\}$ (図 2 で "○" と "△") を置き、 $\{\sigma\} \rightarrow \{\tau, \mu\}$ なる変換を

$$\sigma = \tau \cdot \mu \quad (\tau, \mu \text{ は } \sigma \text{ に隣接したスピンをとる。}) \quad (9)$$

のように定義する。この変換を実行すると、 $n=1$ 近似体の分配関数は $\{\tau, \mu\}$ 表示で

$$Z_1 = \frac{1}{2} \sum_{\{\tau\}} \sum_{\{\mu\}} C \cdot \exp \left[\sum_b K_2(b) \tau_b \tau_{b+1} + \sum_b K'_2(b) \mu_b \mu_{b+1} + \sum_p K_4(p) \tau_p \tau_{p+1} \mu_p \mu_{p+1} \right],$$

$$\begin{cases} K_2(b) = K_x(b) + \frac{1}{4} \ln \frac{\cosh K_-(b) \sinh |K_-(b)|}{\cosh K_+(b) \sinh |K_+(b)|} + \frac{\pi i}{4} \{ \theta(-K_-(b)) - \theta(-K_+(b)) \} \\ K'_2(b) = -\frac{1}{4} \ln [\tanh |K_+(b)| \cdot \tanh |K_-(b)|] - \frac{\pi i}{4} \{ \theta(-K_+(b)) + \theta(-K_-(b)) \} \\ K_4(p) = \frac{1}{4} \ln \frac{\tanh |K_+(b)|}{\tanh |K_-(b)|} - \frac{\pi i}{4} \{ \theta(-K_+(b)) - \theta(-K_-(b)) \} \\ C = \prod_b [\cosh K_+(b) \cosh K_-(b) \sinh K_+(b) \sinh K_-(b)]^{1/4} \end{cases}$$

$$(K_{\pm}(b) = \beta(J_x(b) \pm J_y(b))) \quad (10)$$

と書ける。これにより $\{\sigma\}$ 系がもっていた分配和に寄与しない自由度が除去される。(モンテカルロシミュレーションの観点からいうとエルゴディシティの問題を解消することに相当する。) 次に、この表示において、 μ スピンのみを dual 変換すると、

$$Z_1 = \frac{1}{2} \sum_{\{\tau\}} \sum_{\{\mu^*\}} \exp \left[\sum_b K_x(b) \tau_b \tau_{b+1} + \sum_b K_y(b) \mu_b^* \mu_{b+1}^* - \sum_b K_z(b) \tau_b \tau_{b+1} \mu_b^* \mu_{b+1}^* \right] \quad (11)$$

なる表式を得、結局、 $n=1$ 近似体は Ashkin-Teller モデル (ただし相互作用が各 bond 毎に任意でよい) として表わされることがわかる。そして、この表示で見ると、たとえフラストレーションのある場合でも Boltzmann 因子に負のものが現われず、従って負符号問題は解消される。この変換を用いると、full frustration type の量子 XY モデルの $n=1$ 近似体には相転移がないことが厳密に言える。又、厳密には解けない量子 XXZ モデルに対してもモンテカルロシミュレーションは有効に適用できる。

§ IV. 結び

フラストレーションのある量子スピン系に量子モンテカルロ法を適用しようとする、必ず負符号問題が生じる。負符号問題は、ここで扱ったフラストレーションのある量子スピン系だけでなく、2次元以上の fermion 系でも生じるが、前者ではその問題は波動関数の local な構造に起因するのに対し、後者ではその global な構造に因るという点で、両者における問題の質が異なっているとおもわれる。我々は、正方格子量子 XYZ モデルで Trotter 数 $n=1$ の場合に関り、この問題を解消できるような変換があることを示したが、当然これは、 $n \geq 2$ なる場合に拡張されることが望ましく、又、同じことが他の格子 (例えば三角格子⁶⁾) に対しても期待される。

＜参考文献＞

- 1) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 56 (1976) 1454.
- 2) M. Suzuki, Commun. Math. Phys. 51 (1976) 183.
- 3) 最近の Review として次のものを挙げておく。: H. De Raedt and A. Lagendijk, Phys. Rep. 127 (1985) 233; M. Suzuki, J. Stat. Phys. (1986).
- 4) T. Onogi, S. Miyashita, and M. Suzuki, preprint (submitted to J. Stat. Phys.)
- 5) J. E. Hirsch, R. J. Sugar, D. J. Scalapino, and Blankenbecler, Phys. Rev. B26 (1982) 5033.
- 6) 本研究会 高須、宮下、鈴木、による報告。又は M. Takasu, S. Miyashita, and M. Suzuki, preprint (submitted to Prog. Theor. Phys.)
- 7) M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 2861.
- 8) T. Onogi, S. Miyashita, and M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 73 (1985) 833.