

量子系の Monte Carlo 法の研究

東大理 鈴木増雄, 黒田 昭, 宮下精二

§ 1. 概 論

Monte Carlo 法, 特に平衡状態の Monte Carlo 法は諸量 X の ensemble average ,

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | X e^{-\beta \mathcal{H}} | \alpha \rangle}{\sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | e^{-\beta \mathcal{H}} | \alpha \rangle} \quad (1)$$

(ここで $\mathcal{H}$ は系のハミルトニアン, $|\alpha\rangle$ は系の 1 状態, $\beta = 1/kT$)
 , の $|\alpha\rangle$ についての和が実行困難の時, 状態 $|\alpha\rangle$ を $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$ に比例する確率でとりだし, それによって,

$$\langle X \rangle_{\text{M.C.}} = \sum_{|\alpha\rangle_{\text{M.C.}}} \langle \alpha' | X | \alpha' \rangle / \quad (\text{Monte Carlo steps}) \quad (2)$$

(ここで $\langle \rangle_{\text{M.C.}}$ は Monte Carlo 法による ensemble average, $|\alpha\rangle_{\text{M.C.}}$ は Monte Carlo の 1 configuration)

として求めるものである。

状態 $|\alpha\rangle$ を $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$ に比例する確率でとり出す方法として, kinetic model のように状態を $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$ に従って step させ, $|\alpha\rangle$ が $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$ に従って分布しているような ensemble , つまり平衡状態を作りだし, そこでの平均をとる方法が普通行なわれている。¹⁾²⁾

しかし, すべてが対角化されている古典系では, $\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle = E_\alpha$, $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle = e^{-\beta E_\alpha}$ であるのに対し, 量子系では, $\mathcal{H}$ の固有状態でない $|\alpha\rangle$ について $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$ が一般には計算不可能なため Monte Carlo 法は困難であると考えられ, 現在まで実行されていない。そこで量子系での Monte Carlo 法について一つの方法を提案する。

§ 2. 量子系の Monte Carlo 法

これを近似的に可能にする方法として, $\langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle$ を求めるのに鈴木³⁾に

よって提案された Trotter's formula による $\exp(-\beta \mathcal{H})$ の近似的評価法を用いる。

これはハミルトニアンが十分 short range interaction からなっているとき short range のハミルトニアンを $\mathcal{H}_i$ とし

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^p \mathcal{H}_i \quad (3)$$

とする。Trotter's formula を用いて

$$\exp \{-\beta(\mathcal{H}_1 + \cdots \mathcal{H}_p)\} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\prod_{i=1}^p \exp \left(\frac{1}{n} \mathcal{H}_i \right) \right]^n \quad (4)$$

と書ける。

ここで n を有限 n_0 で止めたものを $n = n_0$ の近似として

$$\begin{aligned} & \langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle_{n=n_0} \\ &= \underbrace{\langle \alpha | \exp \left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_1 \right) \cdots \exp \left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_p \right)}_{1 \text{ st}} \underbrace{\cdots \exp \left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_1 \right) \cdots \exp \left(\frac{\beta}{n_0} \mathcal{H}_p \right) | \alpha \rangle}_{n_0 \text{ th}} \end{aligned} \quad (5)$$

と評価することができる。

今, $\mathcal{H}_i$ は十分 short range だからこれを対角化し $\exp(-(\beta/n_0) \cdot \mathcal{H}_i)$ の行列要素を容易に求めることができる。以後, 簡単のために $(-\beta/n_0) \cdot \mathcal{H}_i \Rightarrow \mathcal{H}_i$ とする。

$\langle \alpha | \exp(-\mathcal{H}_i) | \alpha \rangle$ が求まるから, (5)式は

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \alpha \rangle_{n=n_0} &= \sum_{|\beta_{ij}\rangle} \langle \alpha | \exp(-\mathcal{H}_1) | \beta_{11} \rangle \langle \beta_{11} | \\ & \quad \begin{matrix} i = 1, \dots, n_0-1 \\ j = 1, \dots, p \end{matrix} \cdots \langle \beta_{n_0-1, p-1} | \exp(-\mathcal{H}_p) | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

と求めることができ, Monte Carlo 法はこの範囲で原理的に可能になる。

しかし $|\beta_{i,j}\rangle$ の和を厳密に行うことは, 古典系で Monte Carlo 法を用いずに $|\alpha\rangle$ についての和をとると同程度の計算であり一般に実行困難である。そこでこの和も Monte Carlo 法を用いて計算するのが便利である。つまり Monte Carlo の1状態として

$|\alpha\rangle$ ではなく $\{|\alpha\rangle, |\beta_{i,j}\rangle \mid i=1, \dots, n_0-1, j=1, \dots, p-1\}$ (以後 $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$ と書く) をとるのである。すなわち $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$ が

$$\langle \alpha | \exp(-\mathcal{H}_1) | \beta_{11} \rangle \cdots \langle \beta_{n_0-1, p-1} | \exp(-\mathcal{H}_p) | \alpha \rangle$$

の確率で現われるように step させるのである。

実行する上でもう 1 つ困難なことは、 $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$ を $((n_0-1) \times (p-1) + 1)$ 個の独立な状態の直積として扱うことである。しかしこれも $\mathcal{H}_i$ が十分 short rang であることを用いれば解決する。つまり $\langle \beta_{ij} | \exp(-\beta \mathcal{H}_j) | \beta_{i,j+1} \rangle \neq 0$ であるためには $|\beta_{ij}\rangle$ と $|\beta_{i,j+1}\rangle$ とは $\mathcal{H}_j$ の range 以外では一致していなければならないことを利用すると、short range の中で互いに相互作用している点の数、 N_0 、だけ独立な configuration をもって来て、 $\langle \beta_{i,j} | \exp(-\mathcal{H}_i) | \beta_{i,j+1} \rangle$ は $\mathcal{H}_j$ が関係しているところだけの行列要素であるとすれば $(p-1)$ 個の独立な $|\beta_{ij}\rangle$ は N_0 個の独立な configuration におきかえられる。そこでこの $(N_0 \times (n_0-1) + 1)$ 個の configuration 全体を $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$ と見なすことができるのである。この configuration の中では $\langle \beta_{ij} | \exp(-\beta \mathcal{H}_j) | \beta_{i,j+1} \rangle$ は $\mathcal{H}_j$ に関係している $|\beta_{ij}\rangle$ および $|\beta_{i,j+1}\rangle$ の中の点の関数になる、つまり configuration の中の点に関して対角化されているといってよい。このことは初めハミルトニアン $\mathcal{H}$ で与えられた量子系は $n = n_0$ の近似で $(N_0 \times (n_0-1) + 1)$ 個の configuration を 1 状態とする対角化された系、つまり古典系で表現されることを示している。この対角化された系の configuration は初めの $|\beta_{ij}\rangle$ の configuration に対し n_0 のために 1 次元だけ次元が高い configuration になっている。

この新しい次元の方向を n 方向 と呼ぶことにする。

以上で 1-dim だけ次元が高い系を考えることによって量子系でも、ある近似内で Monte Carlo 法が実際に実現可能であることがわかった。

新しい configuration の中でのエネルギーの計算は注意しなくてはならない。

$$\begin{aligned} \langle E \rangle \cdot Z &= -\frac{\partial}{\partial \beta} Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | e^{-\beta \mathcal{H}} | \alpha \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{|\alpha\rangle} \langle \alpha | \left(\prod_{i=1}^p e^{-\mathcal{H}_i} \right)^{n_0} | \alpha \rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{|\alpha\rangle, k} \langle \alpha | e^{-\mathcal{H}_1} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} \cdots e^{-\mathcal{H}_p} | \alpha \rangle \end{aligned}$$

(k は $(n_0 \times p)$ 個の $e^{-\mathcal{H}_k}$ のすべて)

$$\begin{aligned}
 &= - \sum_{\substack{\alpha \\ \beta_{ij}}} \langle \alpha | e^{-\mathcal{H}_1} | \beta_{11} \rangle \cdots \langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle} \\
 &\quad \cdots \cdots \langle \beta_{n_0-1} | e^{-\mathcal{H}_p} | \alpha \rangle \\
 &= - \sum_{\substack{\alpha \\ \beta_{ij}}} [\{ \langle \alpha | e^{\mathcal{H}_1} | \beta_{11} \rangle \cdots \langle \beta_{n_0-1} | e^{-\mathcal{H}_p} | \alpha \rangle \} \cdot \left\{ \sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle} \right\}
 \end{aligned}$$

(2式より)

$$\langle E \rangle_{\text{M.C.}} = \sum_{\alpha, \beta_{ij}} \sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_k} | \beta'_k \rangle} \Bigg/ (\text{Monte Carlo steps}) \quad (7)$$

同様にして, 比熱 C は

$$\begin{aligned}
 kT^2 C_{\text{M.C.}} &= \frac{\sum_{\text{M.C.}} \left\{ \left(\sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle} \right)^2 - \sum_k \left(\frac{\langle \beta_k | \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle} \right)^2 \right\}}{\text{Monte Carlo steps}} \\
 &\quad + \sum_k \frac{\langle \beta_k | \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle}{\langle \beta_k | e^{-\mathcal{H}_i} | \beta'_k \rangle} \Bigg\} - \langle E \rangle_{\text{M.C.}}^2 \quad (8)
 \end{aligned}$$

§ 3. Spin 系の Monte Carlo 法

以上で考えた方法を nearest neighbour interaction をもつ スピン系で考える。

ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} k_x s_i^x s_j^x + k_y s_i^y s_j^y + k_z s_i^z s_j^z \quad (9)$$

系の状態を表示する方法として s_i^z を対角化する表示の直積をとることにする, もちろんこれは $\mathcal{H}$ を対角化しない。 $\mathcal{H}_i$ として

$$\mathcal{H}_i = k_x s_i^x s_j^x + k_y s_i^y s_j^y + k_z s_i^z s_j^z \quad (10)$$

をとる。ここで $\exp(-\mathcal{H}_i)$ の行列要素を求める。

$$\exp(-\mathcal{H}_i) = \tilde{a} \begin{pmatrix} 1+X_3, 0, 0, X_1-X_2 \\ 0, 1-X_3, X_1+X_2, 0 \\ 0, X_1+X_2, 1-X_3, 0 \\ X_1-X_2, 0, 0, 1+X_3 \end{pmatrix} \begin{matrix} | \uparrow \uparrow \rangle \\ | \uparrow \downarrow \rangle \\ | \downarrow \uparrow \rangle \\ | \downarrow \downarrow \rangle \end{matrix} \quad (11)$$

$$\tilde{a} = \cosh k_x \cosh k_y \cosh k_z - \sinh k_x \sinh k_y \sinh k_z$$

$$X_1 = (\tanh k_x - \tanh k_y \tanh k_z) / (1 - \tanh k_x \tanh k_y \tanh k_z)$$

X_2, X_3 は x, y, z を cyclic にかえたもの

となる。

以後 $k_x = k_y = k_z = k$ Heisenberg Model

$k_x = k_y = k, k_z = 0$ XY_⊥ Model

$k_x = k_z = k, k_y = 0$ XY_∥ Model と呼ぶことにする。

1次元ふえた $|\alpha, \beta_{ij}\rangle$ の configuration 中の相互作用は 4点 $\sigma_i \sigma_j \sigma'_i \sigma'_j$ の 4体力で
あると考えられる。

今 $n_0 = 1$ とすると 1次元系では S_i と相互作用しているのは S_{i-1} と S_{i+1} の 2つだ
から新しい configuration は β, β' の 2つ, これを図示すると

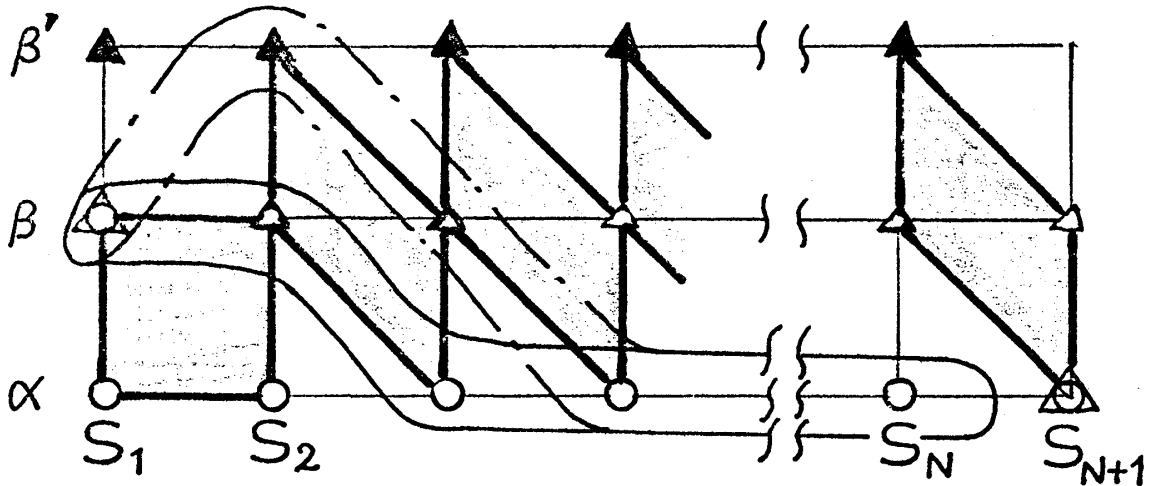


Fig. 1 一次元量子スピン系で $n_0 = 1$ のときの configuration

相互作用は $\square$ で示した 4 体力である。この configuration と $|\alpha\rangle$, $|\beta_{ij}\rangle$ との関係は $|\alpha\rangle$ は $\circ$ 印, $|\beta_{11}\rangle$ は $\square$ で囲んだもの, $|\beta_{12}\rangle$ は $\square$ で囲んだもの, etc である。また $\triangle$ は一致する。

また $\text{trace} \langle \alpha | \dots | \alpha \rangle$ より, $|\alpha\rangle$ と最終状態, $\blacktriangle$ 印は一致しなければならない。これは n 方向の cyclic boundary condition を与える。

ここで $\langle \alpha \beta \beta' |$ について Monte Carlo 法を行えばよいのだが $n_0 = 1$ の場合は鈴木⁴⁾ の pair product model によって解析的に解かれている。そこで $n_0 = 2$ の場合つまり $|\alpha \beta \beta' \beta'' \beta'''\rangle$ について Monte Carlo 法を実行してみることにする。

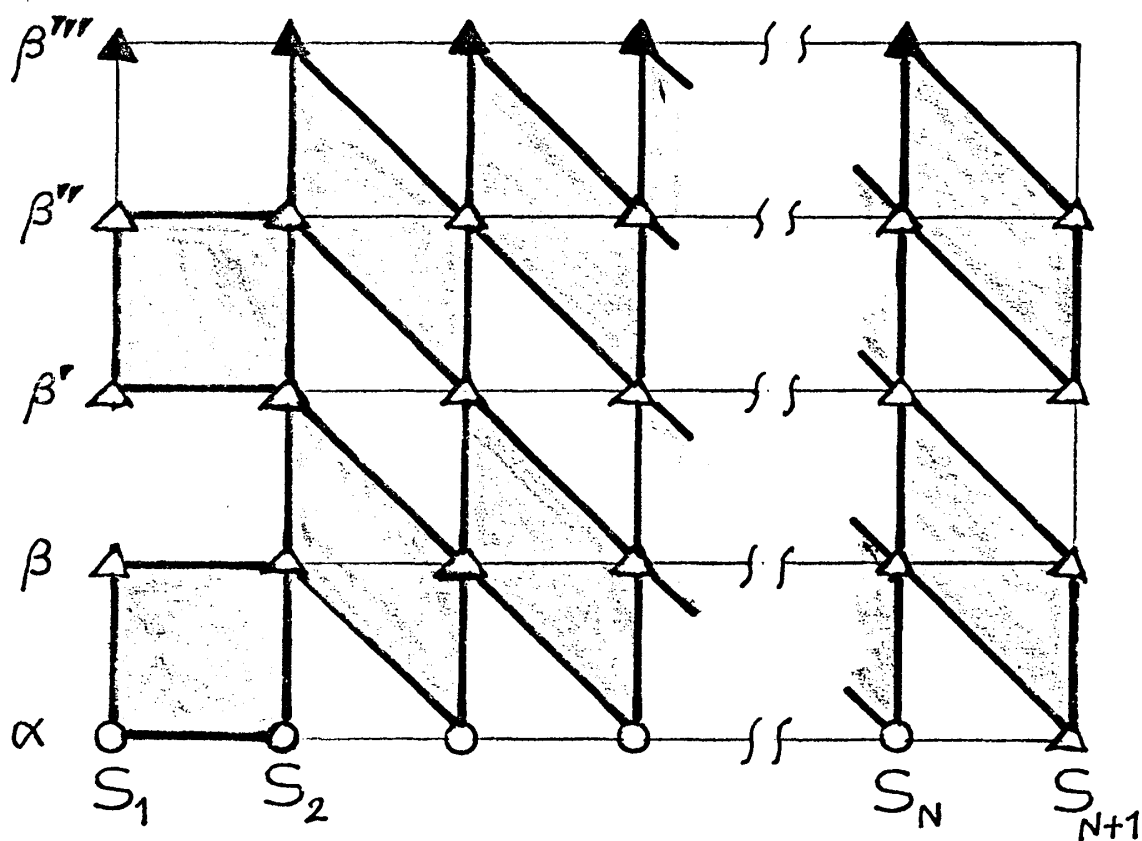


Fig. 2 一次元量子スピン系で $n_0 = 2$ のときの configuration

Monte Carlo 実行時に注意しなくてはならないことは(11)式を見てわかるように $\exp(-\mathcal{H}_i)$ の行列要素が 0 のところがたくさんあるため, もとの configuration で 1 つの

Spin を表わしている $(2n_0 + 1)$ 個の σ を同時に flip させることが重要である。

この simulation の結果得られた、エネルギー、比熱、帯磁率は以下の通りである。それぞれ厳密解、 $n_0 = 1$ (解析解) と比較してある。

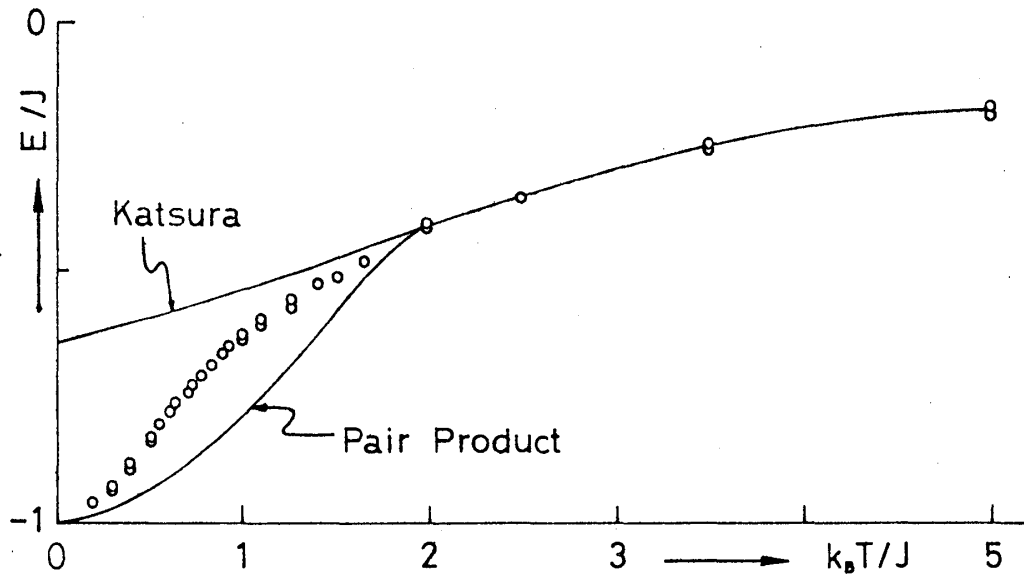


Fig. 3 一次元量子スピン系 Heisenberg Model のエネルギーと温度の関係

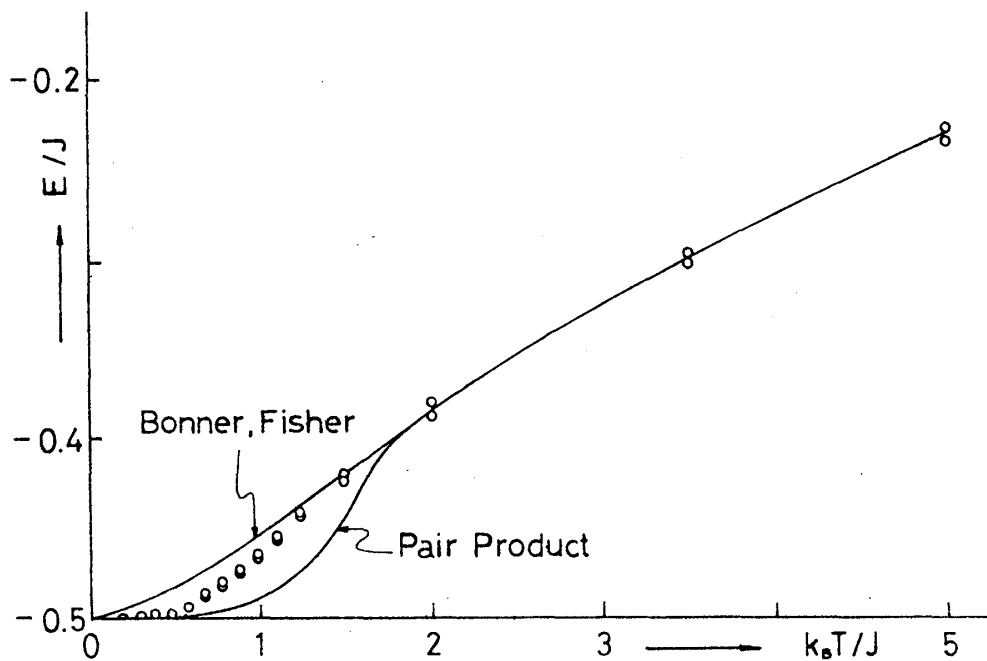


Fig. 4 一次元量子スピン系 XY-Model のエネルギーと温度の関係

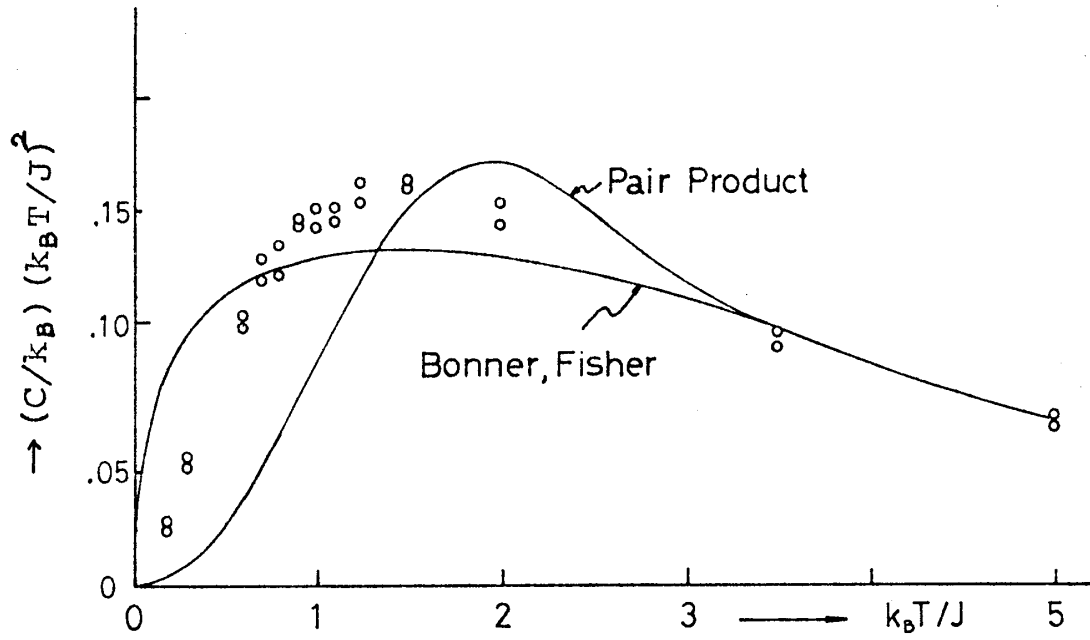


Fig. 5 一次元量子スピン系 Heisenberg Model の比熱と温度の関係

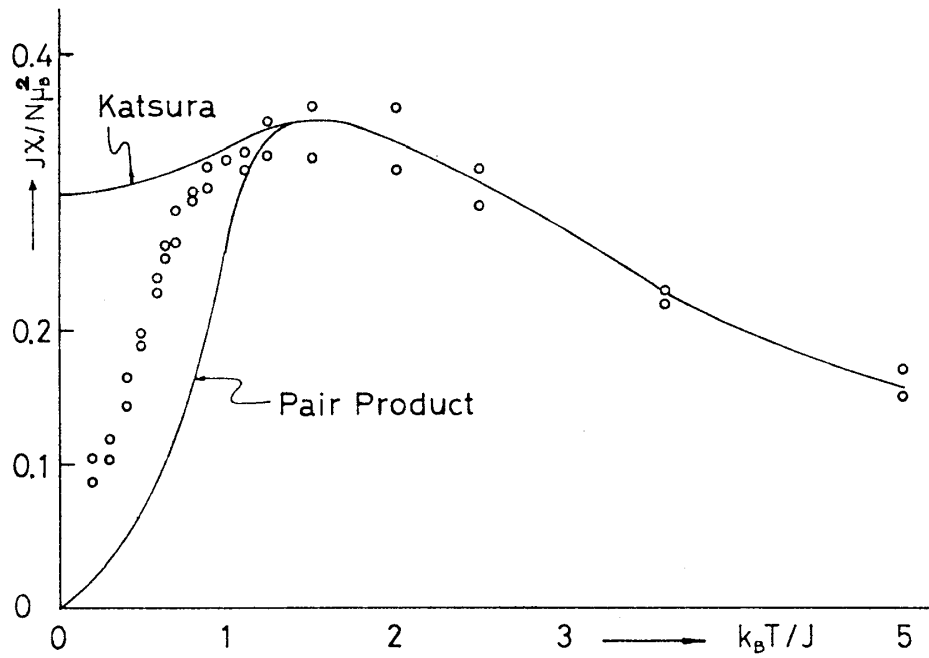


Fig. 6 一次元量子スピン系 XY-Model の z 軸方向の帯磁率 (スピン相関の和) と温度の関係

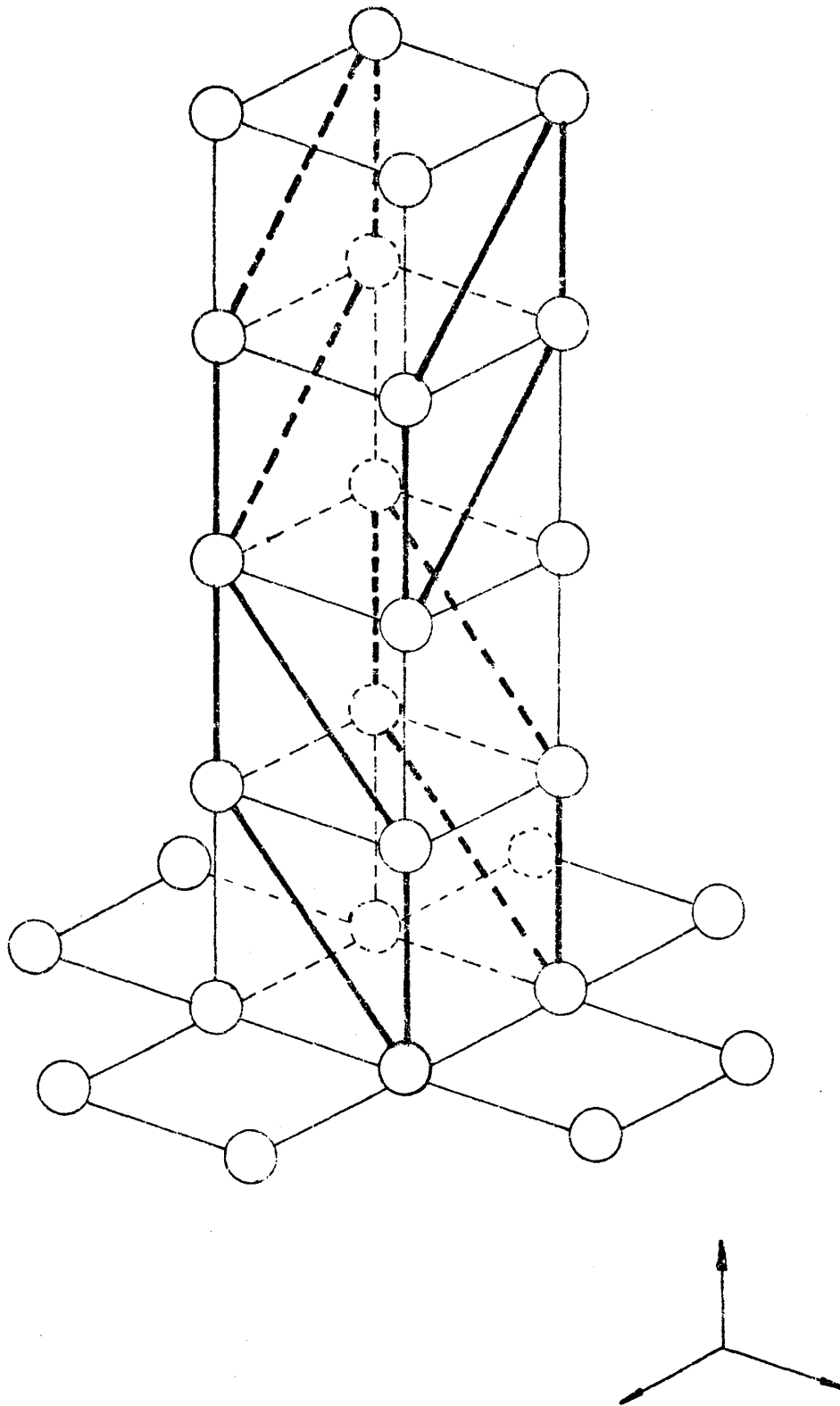
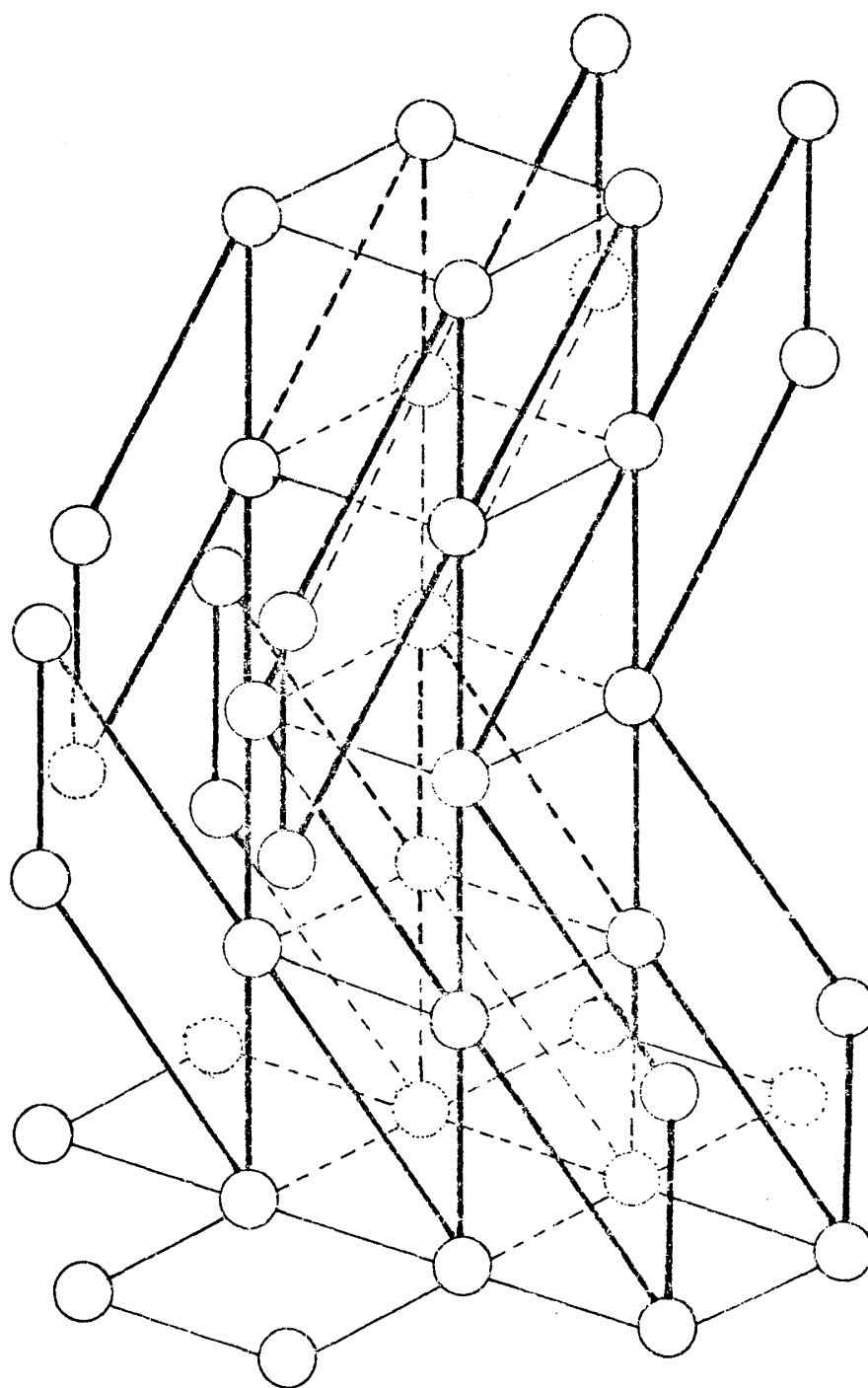
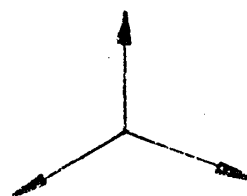


Fig. 7 二次元量子スピン系の $n_0 = 1$ のときの configuration

(a) column が 4 本の場合の 4 体力の図



(b) column が 12 本の場合の 4 体力の図。
simulation のとき周囲 8 本の column のスピ
ンの状態を条件として与え, 中の 1 本のスピ
ンの状態を flip させる。



次に 2 次元系の場合について考えてみる。ハミルトニアンとして

$$\mathcal{H} = \sum_j \sum_i (k_x s_{ij}^x s_{i+1,j}^x + k_y s_{ij}^y s_{i,j+1}^y + k_z s_{ij}^z s_{i+1,j}^z) \\ + \sum_i \sum_j (k_x s_{ij}^x s_{i,j+1}^x + k_y s_{ij}^y s_{i,j+1}^y + k_z s_{ij}^z s_{i,j+1}^z) \quad (12)$$

$\mathcal{H}_i$ とて 1 次元の場合と同様にとり、その並らべ方を(12)式で内側の Σ から評価していく順に並らべるとすると Fig. 1 に相当する図は Fig. 6 を平面上にならべたものになる。

この simulation (2 次元 X Y model) は最近興味を持たれている系であるが、帯磁率に特異性をもち、比熱に発散がないという Betts et al.⁵⁾ と Kosterlitz⁶⁾ らの結果を支持している。この結果の詳細については本誌別稿(鈴木, 宮下, 黒田, 川端「2 次元量子スピン系および古典スピン系のモンテ・カルロ法による研究 — 渦生成型の相転移 —」を参照して下さい。

参 考 文 献

- 1) L. D. Fosdick in *Method in Computational Physics* (edited by B. Alder et al.) Vol. 1 P. 245
- 2) K. Binder in *Phase Transition and Critical Phenomena* Vol. 5B. (edited by C. Domb and M. S. Green) Academic Press, New York.
- 3) M. Suzuki Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454
- 4) M. Suzuki J. Phys. Soc. Japan **21** (1966) 2274
- 5) D. Betts in *Phase Transition and Critical Phenomena* Vol. 3.
- 6) J. M. Kosterlitz J. Chem. Phys. **7** (1974) 1046.
- 7) J. C. Bonner, F. M. Fisher Phys Rev. **135** (1964) A640
- 8) S. Katsura, Prog. Theor. Phys. **20** (1958), 192