論文内容の要旨

論文題目　低次元スピン系の量子モンテカルロ法による研究

氏名　　　羽田野 直道

統計物理学の今日の進展の背景には計算物理学の発達がある．ここ十年で重要な数値計算が幾つも発表され，例えば量子系の研究において多くの示唆がなされた．この論文では量子系をモンテカルロ法で研究した成果を発表する．

量子統計力学における興味ある話題として，超伝導のように，量子効果の巨視的に現れる現象がある．近年，量子効果は特に低次元系に現れやすいとの認識が高まっている．量子ホール効果や高温超伝導などがその例である．

この論文の第二章と第三章で扱うハルデーン問題も，そのような現象の一つに数えることができる．この問題はハルデーンが次の予想を発表したことに始まる．一次元反強磁性ハイセンベルク模型

$$\mathcal{H} = \sum \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_{i+1} \tag{1}$$

の熱力学的極限に関して,「整数スピンの系では (i) 唯一の基底状態の上にエネルギーギャップが開いている，(ii) 基底状態のスピン相関は距離の指数関数で減衰する．一方，半整数スピンの系では，(i) 基底状態の上は連続スペクトルである，(ii) 基底状態のスピン相関は距離の冪で減衰する.」この予想は，スピンの大きさの量子性が巨視的な情報に現れることを述べている点で興味深い．

ハルデーン予想は少なくとも $S \leq 3/2$ では確実視されている．そこに至るまでに数値計算が大きな役割を果たしたことは強調されるべきであろう．その後も計算は続けられ，$S = 1$ の系のギャップと相関長が定量的に評価されている．

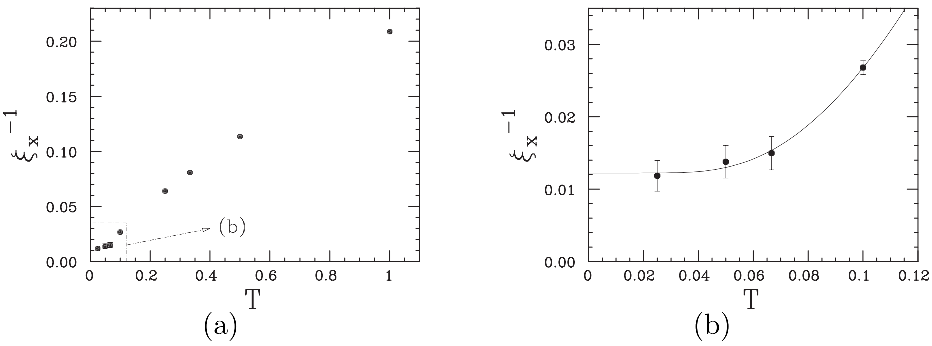

図 1 $S=2$ 反強磁性ハイゼンベルク模型の相関長の温度依存性．(a) 温度領域 $T \leq 1$ と，その拡大図，(b) $T \leq 0.1$．実線は関数によるフィットの結果．

ただし，ハルデーン予想の眼目である「整数スピンと半整数スピンとの違い」を確認するためには，整数スピン系について複数の例を示すことが望まれる．第二章ではこの観点から $S=2$ の系を扱う．特に有限温度での相関長を計算し，絶対零度へ外挿した．

$S=2$ の系は $S=1$ の場合に比べ計算がかなり困難になる．その理由は，一つにはスピン自由度が増えるためであり，一つにはかなりの低温を除いてスピン半整数の場合と区別しにくくなるためである．鈴木-トロッター変換に基く量子モンテカルロ法，特に高麗の提案しているモンテカルロ冪乗法を用いて，これらの困難に対処した．

まず $S=3/2$ と $S=2$ の場合を比較し，低温で両者を定性的にはっきり識別することに成功した．これはハルデーン予想を強く支持する．

図 1 に $S=2$ の系に対する結果を示す．$T \to 0$ で相関長が一定になる様子がわかる．低温のデータ 4 点をフィットした結果，次の評価を得た，

$$S=2 \text{ に対して} \qquad \xi^{-1}(T=0) = 0.012(2). \tag{2}$$

なお図 1 (b) のデータはモンテカルロ冪乗法を用いて得られた．図からわかるように,「$T \to 0$ で相関長有限」と結論するにはモンテカルロ計算が不可欠である．

評価 (2) は以下の意味をもっている．ハルデーンは相関長の S 依存性を

$$S \to \infty \text{ で} \qquad \xi^{-1} \propto S\mathrm{e}^{-\pi S} \tag{3}$$

と見積もっている．$S=1$ での評価を使って式 (3) から $S=2$ での値を予想すると，評価 (2) とよく一致する．つまり式 (3) は $S=1,\ 2$ でも定量的によい評価を与える．よって $S \geq 3$ に対して式 (3) から求めた値も定量的に信頼できる．

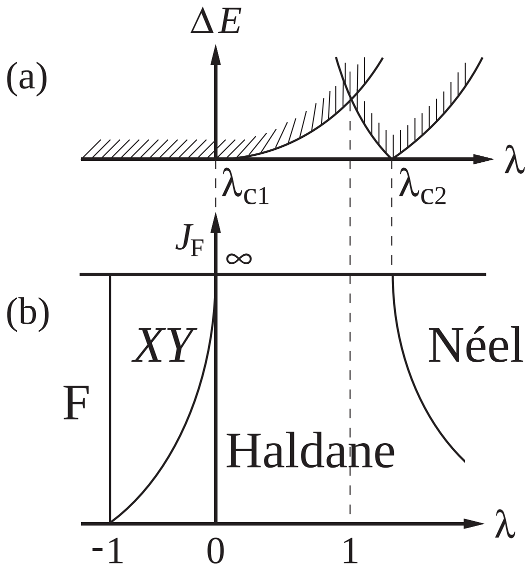

図 2 (a) $S = 1$ 反強磁性 XXZ 鎖 (4) のエネルギーギャップの λ 依存性．(b) $S = 1/2$ 交代ボンド模型 (5) の基底状態相転移の予想される相図.

ハルデーン問題のもう一つの側面に，量子揺らぎが引き起こす基底状態相転移がある．これも量子効果が巨視的に現れる現象として興味が持たれる．第三章では，ハルデーン問題をこの観点から扱う.

模型 (1) を拡張した $S = 1$ の反強磁性 XXZ 鎖

$$\mathcal{H} \equiv \sum \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \lambda S_i^z S_{i+1}^z \right) \tag{4}$$

では，図 2 (a) に示す相転移が予想されている．すなわち，(i) $\lambda \leq \lambda_{c1} \simeq 0$ の範囲で，基底状態の上にギャップのない「臨界線」が続いている（XY 相）．(ii) $\lambda_{c1} < \lambda < \lambda_{c2}$ の範囲で，唯一の基底状態の上にギャップが開いている（ハルデーン相）．(iii) $\lambda > \lambda_{c2}$ の範囲で，2 つの縮退した基底状態の上にギャップが開いている（ネール相）．臨界点 $\lambda = \lambda_{c2}$ でギャップは閉じ，相関長は発散する.

$S = 1/2$ 交代ボンド模型は，この相転移に対するアプローチの一つである．これはハミルトニアン

$$\mathcal{H} \equiv \sum \left(\sigma_{2i-1}^x \sigma_{2i}^x + \sigma_{2i-1}^y \sigma_{2i}^y + \lambda \sigma_{2i-1}^z \sigma_{2i}^z \right) - J_{\mathrm{F}} \sum \boldsymbol{\sigma}_{2i} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{2i+1}. \tag{5}$$

で記述される．この模型は，$J_{\mathrm{F}} \to \infty$ で $S = 1$ の模型 (4) に移行する一方，$J_{\mathrm{F}} = 0$ では独立なダイマーになる．後者の場合の基底状態は σ_{2i-1} と σ_{2i} の一重項の直積であり，励起状態との間にギャップが開いている.

飛田は交代ボンド模型 (5) の $\lambda = 1$，$J_{\mathrm{F}} \geq 0$ の線上を調べ，次のことを示唆した．すなわち，J_{F} を大きくするとともに，模型 (5) の基底状態は模型 (4) の基底状態に連続的に移行する．交代ボンド模型 (5) で更に λ を変化させると，

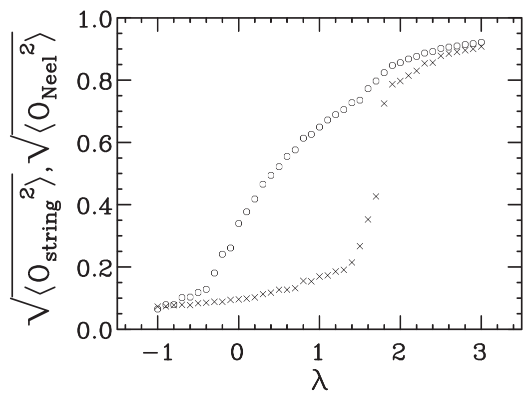

図 3 ストリング秩序変数（○）とスタガード磁化（×）の λ 依存性．系の長さは $N=200$，パラメータは $J_{\mathrm{F}}=5$．統計誤差はプロット記号の大きさ以下である．

図 2 (b) に示した相図が予想される．この相図からわかるように，模型 (4) の相転移は，模型 (5) で J_{F} が有限の時にも観測できると期待される．

第三章では，この交代ボンド模型を量子モンテカルロ法で研究した．

ところで量子モンテカルロ法で基底状態を研究するとき，多かれ少かれ有限温度からの外挿に頼ることになる．しかし臨界点付近では特に温度を下げなくてはならず，統計誤差の増大を引き起こす．そこで試行関数 $|\psi\rangle$ を用意して，

$$\beta \to \infty \text{ で} \qquad \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}}\,|\psi\rangle \longrightarrow \mathrm{e}^{-\beta E_{\mathrm{g}}}\,|\psi_{\mathrm{g}}\rangle \tag{6}$$

となることを使う方法が，幾つか提案されている．試行関数を励起状態と直交させれば，単純に有限温度から外挿するより小さい β で基底状態へ収束する．

ここでは，この公式に鈴木-トロッター分解に基く「世界線」モンテカルロ法を応用することを提案する．式 (6) を用いる他の方法に比べ，(i) 系統的誤差が現れない，(ii) 計算にそれほど時間がかからない，(iii) 試行関数をかなり自由に選べる，などの利点がある．

この方法を用いて交代ボンド模型 (5) を研究し，ハルデーン相を特徴付ける「ストリング秩序変数」とネール相を特徴付ける「スタガード磁化」を評価した（図 3）．図から転移点を $\lambda_{\mathrm{c1}} \sim -0.3$，$\lambda_{\mathrm{c2}} \sim 1.6$ と見積ることができる．

また，式 (6) を用いたことによる基底状態への収束性の改善を確認した．従来の方法と組み合わせて，基底状態への収束判定に使えることもわかった．

上で述べたハルデーン問題は，量子効果で基底状態が無秩序になる現象であった．同じ現象が二次元のフラストレートしたスピン系で起こる可能性がある．この基底状態は高温超伝導と関係付けられ，よく研究されている．

だが，フラストレートした系を量子モンテカルロ法で研究するには大きな問題が残されている．すなわち負符号問題である．これは今や計算物理学の最大の課題の一つである．第四章ではこの負符号問題の解決に向けた方法論の研究を報告する．

興味あるフラストレートした系として次の J_1-J_2 模型がある：

$$\mathcal{H} \equiv J_1 \sum_{\text{n.n.}} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j + J_2 \sum_{\text{n.n.n.}} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \qquad \text{ただし } J_1,\ J_2 > 0. \tag{7}$$

（第一項は正方格子の隣接格子点，第二項は次隣接格子点に関する和を表す.）領域 $J_1 \gg J_2$ では隣接格子点に関するネール秩序が存在し，領域 $J_1 \ll J_2$ では次隣接格子点に関するネール秩序が存在するものと思われる．二つの秩序の狭間 $J_1 \simeq 2J_2$ では，無秩序な基底状態「スピン液体」の実現される可能性がある．

ところで，第二・三章で用いた鈴木-トロッター変換に基く量子モンテカルロ法では，まず量子系の分配関数をある古典系の分配関数

$$Z = \sum W\{\sigma\} \tag{8}$$

で近似する.（ここで $\{\sigma\}$ は古典系のスピン配位，$W\{\sigma\}$ はそれに対応するボルツマン重み，和記号はあらゆるスピン配位に関する和を表す.）次にその古典系のシミュレーションの結果を外挿して量子系の情報を得る．

これを J_1-J_2 模型 (7) に適用すると，式 (8) の W に負の項が現れる．このような系はそのままではシミュレートできない．そこで次の方法が行われてきた．すなわち，ボルツマン重み $|W|$ で定義される系をシミュレートし，観測量を補正して系 (8) における結果を得るのである．しかしこの方法は低温で破綻する．データの統計誤差が非常に大きくなるからである．これを負符号問題という．

第四章では負符号問題の原因を次のように説明する．知りたい系 $\sum W$ とシミュレートする系 $\sum |W|$ は物理的に異なっている．低温で両者の正準分布の重なりは小さくなり，知りたい系の状態がシミュレーションの中でほとんど現れなくなる．このためデータの統計性が悪くなる．

この説明を裏付けるため，シミュレートする系がどういう物理系なのかを調べる．まずその系のハミルトニアンを具体的に書き下す議論を展開する．次にそれを用いて，シミュレーション時の統計誤差を事前に評価する方法を示す．これによってアルゴリズムを最適化できるようになった．

更に，上で述べた負符号問題の原因の説明に基き，以下の方法で負符号問題が緩和される可能性を指摘する．シミュレートする系として，$\sum |W|$ で定義される系ではなく，知りたい系と物理的に似通った系を選ぶのである．例えば J_1-J_2 模型 (7) でネール秩序が期待される領域では，ネール秩序の強い $J_2 = 0$ の模型をシミュレートする．データ解析においては，古典系で行なわれるリウェイティング法を使う．実際にこれを用いた他の研究で成果が上がりつつある．

最後に第五章で，現在使われている様々な量子モンテカルロ法のうち主なものを，方法論の側面を強調しつつ概観する．