

論文内容の要旨

論文題目 新しいアルゴリズムを使った モンテカルロ法による量子スピン系の研究

{Monte Carlo simulation of quantum spin systems with
new algorithms}

氏名 塚本 光昭

経路積分表示を用いた量子モンテカルロ法は、時空間上のスピンの状態をモンテカルロ法によりサンプリングをする方法であり、スピン系の研究をする上で非常に重要な手法である。特にループアルゴリズムを始めとして、古典系で提案されたクラスターアルゴリズムが量子系に適用されて以降、ますますその重要性は高まっている。しかし、これらのアルゴリズムを用いても状態更新の方法は一意的には決まらず、場合によってはシミュレーションの効率が著しく低下することがある。また今までにない形の相互作用を扱うには、様々な工夫がある。そこで本研究では、最近注目されている下記の2つの系について量子モンテカルロ法を用いた計算を行い、効率の良いアルゴリズムの提案や4体の相互作用がある場合の計算方法について調べた。

1. 容易軸異方性のあるハイゼンベルクモデル

これは、スピン1を持つNi化合物 $\text{NiCl}_2\cdot 4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ (DTN) の磁場誘起相転移を説明するために提案されたモデルであり、以下のハミルトニアンで現される。

$$\mathcal{H} = \sum_{i,\nu} J_\nu \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\nu} + D \sum_i (S_i^z)^2 - g\mu_B \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i \quad (1)$$

ここで $D \geq J$ のため、 $H = 0$ では基底状態は $|S^z = 0\rangle$ で、ギャップが開いている。磁場 H をかけることでギャップを潰し、有限温度で3次元的な磁気秩序を持つようになる。この

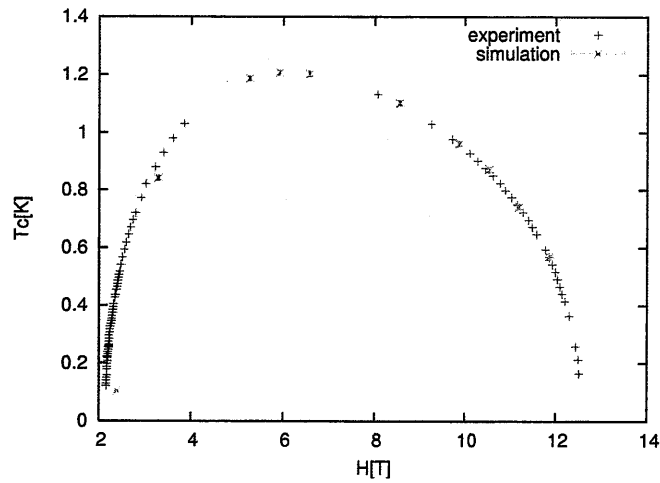


図 1: シミュレーションによって得られた相図と実験結果との比較。相境界の低磁場側と高磁場側での非対称な形を含めて実験とよく一致している。

磁場誘起相転移はマグノンのボーズ・アインシュタイン凝縮として理解できるため、DTN について中性子散乱、磁気熱容量の測定、ESR などの実験が盛んに行われた。我々は、このモデルの量子モンテカルロ法にシミュレーションを行い、スピン間の交換相互作用を求め、温度磁場相図を描いて実験結果と比較した。上図は、計算により得られた相図と実験により得られている相図との比較であるが、実験結果を上手く再現している。このとき、スピン間の相互作用の強さは $J_x = J_y = 0.1815\text{K}$ 、 $J_z = 2.2\text{K}$ であった。

さらに、 $H = 0$ で D と J の大きさの比を変えたときに起きる圧力誘起の相転移についても調べて相図を書いて、量子臨界点近傍での相境界のべきに log 補正が以下の形

$$T/J \propto |D/J - (D/J)_c|^{1/2} |\ln |D/J - (D/J)_c||^{-1/5} \quad (2)$$

でつくことを導き、この式を用いた計算で得られた相境界をフィッティングして log 補正があることを確認した。

また本研究においては、スピン 1 の系をシミュレーションする上で、効率の良いアルゴリズムの提案も行う。またアルゴリズム間での計算効率の比較を行い、アルゴリズムの選択が効率に大きな影響を与えることを確認した。

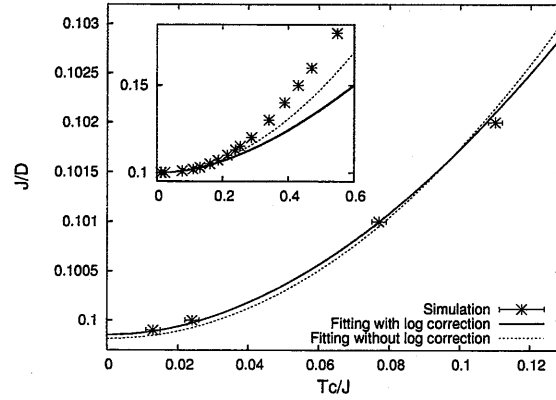


図 2: J/D vs. T_c/J の相図。図の直線は log 補正項を含めて、破線は log 補正項を含めずにフィッティングしたもの。挿入図は挿入図の全体像である。また $(D/J)_c = 10.0019(2)$ である。

2. 4 体相互作用のあるハイゼンベルクモデル

4 体相互作用のあるハイゼンベルクモデルとは、以下のハミルトニアンで書き表されるモデルである。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{\langle p \rangle} Q \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right) \left(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l - \frac{1}{4} \right) \quad (3)$$

右辺第 2 項の p についての和は正方格子のプラケットについての和であり、格子点 i, j, k, l は p の 4 隅の点で、さらにボンド (i, j) と (k, l) が並行になるようにとる。この系は、 $J/Q > 1$ のときには基底状態は Néel 状態であるが、 $J/Q < 0.04$ ではシングレット状態にあるダイマーで構成される VBS 状態にある、ということが分かっている。また、このモデルが初めて提案されたとき、Néel 状態から VBS 状態が 2 次転移で、近年提案された deconfine critical phenomena (非閉じ込め臨界現象) との関連で注目を集めた。非閉じ込め臨界現象の理論では、VBS 状態と Néel 状態のように、破れている対称性が違う 2 つの状態間で 2 次相転移が起きるといふ。我々はループアルゴリズムを用いて 4 体相互作用の項を取り扱う方法を示し、さらに $J/Q = 0$ での VBS 状態について調べた。この VBS 状態は、格子の Z_4 対称性が破れた相であるとの予想があったが、ダイマーの秩序変数のヒストグラムをとると、下図のように系が見掛け上 $U(1)$ 対称性を持っているかのように見える。もし本当に Z_4 対称性の破れる転移が起きているなら、これは離散的な対称性の破れであるから有限温度で相転移が起こりうる。そこでこの系の有限温度での系の振る舞いを調べ、相転移温度を決めた。また有限サイズスケーリングにより臨界指数の値を求めて転移のユニバーサリティークラスを調べた。結果得られた臨界指数は $\nu = 0.68(1)$ 及び $\eta = 0.55(2)$ であった。これは、予想される Z_4 対称性の破れる転移温度のユニバーサリティーのものとはことなる値である。

本研究は、このように最近注目を集めている 2 つ系についてより効率のよいアルゴリズム

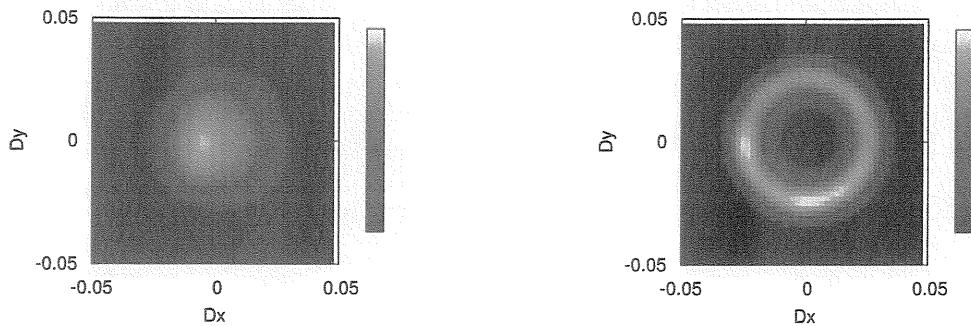


図 3: ダイマー秩序のヒストグラム $P(D_x, D_y)$ 。左側が $\beta = 10$ 、右側が $\beta = 20$ である。 Z_4 対称性の破れた VBS 状態であれば、ヒストグラムの形は丸くならず、4つのピークが現れると予想される。 $\beta = 10$ ではダイマー秩序は出ておらず、 $\beta = 10 \sim 20$ の間に VBS 相への有限温度転移があることがわかる。

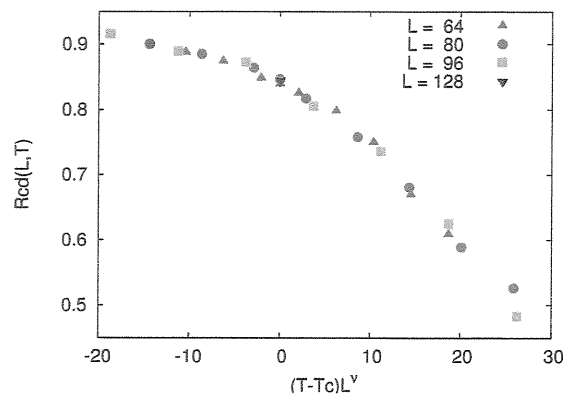


図 4: ダイマー相関の比の有限サイズスケリング。得られた結果は $T_c = 0.065$ $\nu = 0.68(1)$ であり、図はこの値を用いてプロットしたもの。全ての L で同一曲線上に乗っている。

を提案し、量子モンテカルロ法によるシミュレーションを行ったものである。その結果、Ni系化合物については交換相互作用の強さを見積もることが出来、さらにまた VBS 相などの今までに無い特徴を持った相を調べることが出来た。