

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2007～2010

課題番号：19540398

研究課題名（和文）量子スピン系の新たなモンテカルロ計算方法（確率的状態選択法）

研究課題名（英文） A New Monte Carlo Method in Quantum Spin Systems (Stochastic State Selection)

研究代表者

宗久 知男 (MUNEHISA TOMOO)

山梨大学・大学院医学工学総合研究部・教授

研究者番号：30174254

研究代表者の専門分野：数物系

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：計算物理学、量子スピン、モンテカルロ法、三角格子、確率的状態選択法

1. 研究計画の概要

量子力学・場の量子論において、ハミルトニアンから物理量を数値計算する第一原理的方法は極めて重要であり、スピン、電子の多体問題において近年目覚ましく進歩した。具体的に言えば、厳密対角化法、量子モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法(DMRG法)などである。しかし、これらの方法に負符号問題、サイズの制限、次元の制限などの大きな欠点がある。この研究課題は、これらの欠点を克服する新たな第一原理的な数値計算方法である「確率的状態選択法」の開発である。確率的状態選択法では、状態にハミルトニアンを次々と演算してゆく間に計算途中で現れる状態を確率的に落すが、統計平均をとることにより、状態を落しても正しい結果を得られることが数学的に保証される。固点節(Fixed Node)法などの方法と違い、この方法は物理的の仮定を含まない。この確率的状態選択法をフラストレートした量子スピンシステムに適用して、色々な物理量を計算する。

2. 研究の進捗状況

(1) 確率的状態選択法

確率的状態選択法 JPSJ 72 (2003) 2759-276で初めて公表した。この方法では、on-off 確率密度関数により、確率変数 X は 0 または有限の値 a をとり、 X の平均は 1 になっている。この確率変数を波動関数の個々の係数に掛ければ、その係数はゼロとなる、つまり「無くなる」ことが確率的に起こる。しかし平均は 1 なので平均をとれば、元の情報を復元できる。この確率変数を対角成分に持ち、非対角成分がゼロである行列をつくり、この行列を状態に作用させ、別の状態との内積を作る。

確率変数を含んだこの内積の平均をとれば、元の内積が得られることになる。

(2) 三角格子ハイゼンベルク量子スピン系提案方法を実用的方法とするための改良をおこない、表題の系を計算対象に適用した。この系において良い試行状態を作り出す方法について研究し、これを確立した。

(3) 統計的平衡

確率的状態選択法では負符号の問題が生じる系においても十分な状態数をとれば統計的平衡があることを見出した。これにより高精度でエネルギー固有値が求められることがわかった。

(4) 制約条件付き確率的状態選択法

この方法は多数の確率変数を用いるので、一部の確率変数を他の確率変数に従属させることができる。この従属性を用いて、確率的状態選択を適用する状態と特定の状態との内積をどのサンプルにおいても一定にすることができる。この方法—「制約条件付き確率的状態選択法」と呼ぶ—の理論的研究をおこなった。

(5) 磁化とマグノンスペクトラム

(4) に述べた方法により飛躍的に計算精度を向上させることができ、実用的計算が可能になった。実際、基底状態および励起状態、波数ベクトルをもったマグノンを含めたエネルギー計算と基底状態の副格子の磁化の計算をできるようになった。スピンの Z 成分

が0, 1, 2, 3, 4の状態の最低エネルギーや副格子磁化の計算結果により、三角格子量子スピン系が自発的対称性の破れを起こしていることを理解できた。さらに波数ベクトルをもったマグノンのスペクトラム計算により、系の不安性への理解がすすんだ。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

この研究課題は確率的状態選択法を実用的計算方法として研究開発をおこない、48サイト三角格子ハイゼンベルグ量子スピン系での物理量を計算することである。この目的に対して、試行関数の改良、制約付き方法の開発により、いろいろな物理量を計算できるようになった。

4. 今後の研究の推進方策

(1) 変分モンテカルロ法との融合

負符号問題のある量子スピン系でよくもちいられている方法の一つとして変分モンテカルロ法がある。これはエネルギー最低の状態に試行関数を仮定して、この試行関数の状態に対するエネルギー期待値をモンテカルロ法で計算する。試行関数に含まれているパラメータを変えることにより、最低エネルギーを推測するものである。この変分モンテカルロ法は大きなサイズでも計算が可能である特徴があるが、方法が試行関数に依存しているため、出た結果の精度について何も言えない。しかし変分モンテカルロ法でサンプルしている状態の集まりを確率的状態選択法適用後の状態とみなすことにより精度の評価が可能になる。この関係について理論的基礎研究を行ない、48サイトより大きな三角格子量子スピン系での計算可能性を探求する。具体的な計算対象は三角格子XXZ量子スピン系であり、この系にはより古典的描像が適用できることが期待され、近似精度が高い試行関数がえられることが予想されている。

(2) 統計的平衡の実現

先の研究で負符号の問題が生じる系においても十分な状態数をとれば統計的平衡があることを見出し、このことを用いれば、高い精度でエネルギー固有値が求められることがわかった。しかし、このままでは実用できでなくさらなる研究開発がおこなう必要がある。研究の方向性としてSorellaが開発したreconfiguration法のアイディアを確率的状態選択法に組み込むことを考え、研究開発をおこなう。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者に

は下線)

[雑誌論文] (計2件)

(1) A Constrained Stochastic State Selection Method Applied to Frustrated Quantum Spin Systems

J.Phys:Condens. 21(2008)236008-236019

T.Munehisa, Y.Munehisa 査読有

(2) An Equilibrium for Frustrated Quantum Spin Systems in the Stochastic State Selection Method

J.Phys:Condens. 19(2007)196202-196220.

T.Munehisa, Y.Munehisa 査読有

[学会発表] (計8件)

① 宗久知男, 確率的状態選択法によるスピン 1/2 三角格子ハイゼンベルグ反強磁性体の励起エネルギー計算, 2010年3月20日, 岡山大学

② 宗久知男, 確率的状態選択法による三角格子ハイゼンベルグ量子スピン模型の励起エネルギー計算, 2008年9月20日, 岩手大学

③ 宗久知男, 確率的状態選択法による三角格子量子スピン系の変分波動関数の評価, 2007年9月22日, 北海道大学

[その他]

<http://www.ccn.yamanashi.ac.jp/~munehisa/munehisa/index-j.html>