様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成２３年５月２７日現在

機関番号：１３５０１
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

研究成果の概要（和文）：量子スピン系でハミルトニアンから物理量の数値計算をする第一原理的な方法である「確率的状態選択法」の開発を行い、従来の方法では困難であった三角格子スピン系の物理量を計算することを可能にし､エネルギーなど物理量の計算をおこなった｡色々なスピンＺ成分の状態の最低エネルギーやその他の物理量の計算結果により、三角格子量子スピン系で自発的対称性の破れが実現していることに数値的な証拠を提出し、スピン系での南部ボソンを確認できた。

研究成果の概要（英文）：
We developed a new method to calculate physical quantity in the quantum spin system. This method is one of first principle methods and called as a stochastic state selection method. By this method we can calculate energy and other quantity in triangular lattice. In this system our results indicate that the spontaneous symmetry breaking occurs and the Nambu boson exists.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2007 年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2008 年度	900,000	270,000	1,170,000
2009 年度	500,000	150,000	650,000
2010 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総　計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：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．研究開始当初の背景
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の開発が望まれていた。

２．研究の目的
開発する数値計算方法を「確率的状態選択法」と呼ぶ。この方法では、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その係数をゼロにして計算から除く。これにより、状態が爆発的に増加することを防ぎ、計算を可能にする。

確率に無視されるのでそのままでは正確な内積は得られないが、この操作を何度も繰り返して統計平均をとることにより、状態を確率的に除いても正しい内積結果を得られる。この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、この方法は物理的仮定を含まない。この確率的状態選択法を実用的方法になるよう開発研究し、負符号問題をもつ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ことが研究目的である。

３．研究の方法

この研究は数値計算方法の開発であるので、研究の方法は、アリゴリズム開発とその検証、並びに物理系への適用つまり、ワークステーションを用いた数値計算である。

４．研究成果

(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。正確に言えば確率 P(x)を次のように定義する。

P(x=0)=1-1/a　　　P(x=a)=1/a
<X>=aP(x=a)=1

ここで a の値を 1 以上として x=0 の確率を与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。詳しくのべると波動関数$|\psi>$は基本状態|i>と係数 c_i で与えられる。

$$|\psi>=\sum_i |i>c_i$$

確率変数をかける演算子 M は次の式で定義される。

$$M|\psi>=\sum_i |i>c_i X_i$$

となる。 ここで P(x_i=c_i/e)として小さな係数はこの確率変数をかけられてゼロになる。e は定数である。そしてこの状態と別な状態

$$|\phi>=\sum_i |i>b_i$$

との内積をとる。

$$<\phi|\psi>=\sum_i |i>b_i c_i X_i$$

この値は内積の正確な値と異なるが、統計平均の値は等しくなる。また確率変数 X_i を独立しているため、和の状態数が多ければ統計精度があがる。

このことを簡単な系で示した。4x4 正方格子スピン系で exact な状態に対して確率的状態選択法を適用した結果は次の通りである。

E(exact)=-11.2285
<< E >> = -11.220 +- 0.017

ここでのサンプル数は 1000 である。全状態数は約 1.3 万であるが、計算に用いた状態数は約 700 である。

(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を研究し、これを確立した。

良い試行状態作成の方法であるが、計算機のメモリ限度の状態数を定め、その状態数のヒルベルト空間つまり限定ヒルベルト空間でエネルギー最低状態の近似状態を見つける。ここでの要点はハミルトニアンを何回か演算するとこの限界に達するが、そうしたら係数の小さい状態を捨てて小さなサイズの状態を作り、またハミルトニアンを何回か演算する。そしてこの繰り返しをエネルギー近似値が変化しなくなるまでおこなう。

４８サイトの系で近似状態を求めた。その状態数は約 7500 万であり、近似エネルギーの値は-25.950 であり、３６サイトの正確な値から推測される値と 2%程度の差である。

この近似状態に対して１０－２０回のハミルトニアンを演算する。計算に現れる状態をすべて保持できないので「確率的状態選択法」で状態を確率的に除いて計算をおこなう。その結果は、サイトあたりのエネルギーは

-0.1833 +- 0.0003

である。

(3) 統計的平衡

確率的状態選択法では状態を確率的に除外して十分小さなサイズの状態数にして、その状態にハミルトニアンを演算する。この操作は繰り返して行うことができる。ハミルトニアンの成分がすべてゼロまたは負であれば、多くの繰り返しで平衡状態に達する。この平衡状態ではエネルギー統計分散が有限に留まっている。このことを式で表す。確率変数をかける演算子M、ハミルトニアン　H として　m 番目の状態|m>から(m+1)番目の状態|m+1>を生成する。D_m は規格化定数である。

$$HM|m>=|m+1>D_m$$

このMとHの演算は繰り返して操作できるが統計的揺らぎを含んでいるのでmを大きくしたとき、状態　|m> が統計平均で得られる状態からの揺らぎの大きさがmの指数関数になっている時は大きなmに対して意味ある量は得られない。ここで述べている平衡状態とはこの揺らぎの大きさがmによらない一定値になっていることである。

いわゆる負符号の問題が生じる系､つまり上記の条件を満たさないハミルトニアンにおいては､状態数が少ないとき統計分散が繰り返し回数とともに増大して平衡は見いだせない。しかしながら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。この方法をJ1-J2正方格子量子スピン系４０サイトに適用した。繰り返し回数は50回、保持した状態数は3x10^8である。得られたエネルギーの値は

-19.90 +-0.02

である。

(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、つまり統計的揺らぎをゼロ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。このことを詳しく述べる。確率変数をX_1とそれ以外にわける。

$$M|\psi>=|1>c_1X_1+\sum_{i\geq 2}|i>c_iX_i$$

確率変数 X_1 をほかの確率変数の従属変数として

$$|\phi>=\sum_i |i>b_i$$

との内積

$$<\phi|\psi>=\sum_i b_ic_i$$

正確になるように決める。

$$<\phi|M|\psi>=b_1c_1X_1+\sum_i b_ic_iX_i$$

確率変数X_1 をほかの確率変数の線形関係にあるので他の確率変数の平均値が1であることからX_1の平均値も1と言える。

具体的には特定な状態との内積が一定になるように基本状態の係数をほかの基本状態の係数から決める。実際の適用では特定な状態に近似状態をとる。このことにより、ハミルトニアンのべき乗法でエネルギーを求めることが可能になった。３６サイトのハミルトニアンの２０べき乗の期待値での計算で数値をしめす。１００サンプルで統計誤差（相対値）が2%（制約なし）から0.05%（制約つき）に激減した。

(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。４８サイト三角格子ハイゼンブルグ量子反磁性スピン系でスピンのＺ成分が０，１，２，３、４の状態の最低エネルギーを計算した。その結果は次の有限系の式

E(s)-E(0)=c S(S+1)/N

によくフィットすることが分かった。この式でE(S)はスピンのＺ成分がS状態の最低エネルギーであり､N はシステムの格子数、c は定数である。すでに知られている３６サイトの結果も含めて説明できる。

この式は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仮定すると導かれる。

さらにスピン静的構造関数の計算や波数ベクトルをもったマグノンのスペクトラム計算も自発的対称性の破れを強く支持している。自発的対称性の破れは質量ゼロの南部ボソンが２つ存在することを意味している。有限系での存在の数値的立証は困難であるが、今回の計算結果は２種類の南部ボソンの存在をサポートしている。

(6)変分モンテカルロ法との融合

負符号問題のある量子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した。具体的な計算対象は三角格子 XXZ 量子スピン系である。この系はより古典的描像が適用可能であり、良好な試行関数が得られる。確率的状態選択法を用いて近似精度の評価を行い、最低エネルギーは 1%以下の精度で得られることを確認できた。この方法により大きなサイズ１４４、３２４の格子でも系の数値計算が可能になった。この結果はまだ公表していないが、順次発表する予定である。

５．主な発表論文等
（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３件）

① Numerical study of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a 48-site triangular lattice using the stochastic state selection method
arXiv cond-mat1008161(2010)1-15
T.Munehisa, Y.Munehisa 査読無

②A Constrained Stochastic State Selection Method Applied to Frustrated Quantum Spin Systems
J.Phys:Condens. 21(2009)236008-236019
T.Munehisa, Y.Munehisa 査読有

③ 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〕ホームページなど
http://www.ccn.yamanashi.ac.jp/~munehisa/munehisa/index-j.html

６．研究組織
(1)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

(2)研究分担者
なし

(3)連携研究者
なし