

講義 「スピン物性物理」 第12回～第14回 (藤堂)

- 講義内容：多体量子系の物理
 - 低次元スピン系における様々な量子状態
 - 相転移と臨界現象
 - 実験技術としての計算機シミュレーション

講義 「スピン物性物理」 第12回

- 低次元スピン系における様々な量子状態と理論的アプローチ
 - 強磁性状態、非磁性状態(VBS状態)、フェリ磁性
 - Perron-Frobenius の定理
 - Marshall-Lieb-Mattis の定理
 - Lieb-Schlutz-Mattis の定理
 - Majumdar-Ghosh, Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki, Shastry-Sutherland 模型
- 低次元スピン系における様々な量子状態
 - Valence-Bond-Solid (VBS) 状態
 - 隠れた秩序
 - 直交ダイマー系

様々な量子スピン模型

- 量子ハイゼンベルグ模型 ($J > 0$: 反強磁性、 $J < 0$: 強磁性)

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle j,k \rangle} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k = J \sum_{\langle j,k \rangle} \left[S_j^z S_k^z + \frac{1}{2} (S_j^+ S_k^- + S_j^- S_k^+) \right]$$

- XXZ 模型 ($|\Delta| < 1$: イジング的・容易軸的、 $|\Delta| > 1$: XY的・容易面的)

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle j,k \rangle} \left[S_j^z S_k^z + \Delta (S_j^x S_k^x + S_j^y S_k^y) \right]$$

- 横磁場イジング模型

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle j,k \rangle} \sigma_j^z \sigma_k^z - \Gamma \sum_j \sigma_j^x$$

- 格子: 1次元鎖、ジグザグ鎖、はしご、正方格子、立方格子、、、

スピン代数の復習

- スピン演算子 $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$, $\mathbf{S}^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$

- スピン演算子の交換関係

$$[S^x, S^y] = iS^z, \quad [S^y, S^z] = iS^x, \quad [S^z, S^x] = iS^y, \quad [\mathbf{S}^2, S^\alpha] = 0$$

- スピン昇降演算子

$$S^\pm = S^x \pm iS^y, \quad S^x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-), \quad S^y = \frac{1}{2i}(S^+ - S^-)$$

- 行列表示 ($S=1/2$)

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- $S=1$ の場合

$$S^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

スピン2つの系 ($S=1/2$)

- ・ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{J}{2} \left[(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 - \frac{3}{2} \right]$$

- ・ $J < 0$ (強磁性)の場合 : $(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$ を大きくしたい
 - ・スピン三重項 ($S=1$) が基底状態 : エネルギー = $(1/4)J$

$$|\uparrow\uparrow\rangle \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \} \quad |\downarrow\downarrow\rangle$$

- ・ $J > 0$ (反強磁性)の場合 : $(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$ を小さくしたい
 - ・スピン一重項 ($S=0$) が基底状態 : エネルギー = $-(3/4)J$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \}$$

Perron-Frobenius の定理

- 正の正方行列 A (すべての要素が正) について以下が成り立つ
 - 他の全ての固有値よりも絶対値の大きな正の固有値 r が存在する
 - 固有値 r は単純固有値である (縮退していない)
 - 固有値 r に対する右(左)固有ベクトル v (w) は正のベクトルである
 - 固有値 r は $\min_i \sum_j a_{ij} \leq r \leq \max_i \sum_j a_{ij}$ を満たす
- A が零の要素を持つ場合でも A が原始的(primitive : ある自然数 n が存在して $A^n > 0$)である限り, 上の結果は成り立つ

Perron-Frobenius の定理の証明

- 正の実対称行列の場合について、以下の順序で背理法を用いて証明する
 - ベクトル u が A の固有ベクトルで、全ての i について $u_i \geq 0$ を満たすならば、全ての i について $u_i > 0$ が成立する
 - A の最大固有値に属する固有ベクトル u は、全ての i について $u_i > 0$ を満たす
 - 最大固有値に属する固有ベクトルは縮退していない

Perron-Frobenius の定理 (量子スピン系版)

- 非対角要素が負あるいは零の正方行列 H (ハミルトニアン)について、ある自然数 n が存在して H^n の全ての非対角要素が非零になる場合、以下が成り立つ
 - 最低固有値は単純固有値である (縮退していない)
 - 最低固有値に対する固有状態の成分は全て正にとることができる
- ハイゼンベルグ模型のハミルトニアンが以下を満たす場合、全 S_z ごとの部分空間において Perron-Frobenius の定理が成り立つ
 - 全ての格子点が相互作用によってつながっている
 - 全格子が2つの部分格子から構成され、異なる部分格子の間の相互作用が反強磁性的、同じ部分格子の間の相互作用は強磁性的 (二部格子)

Marshall-Lieb-Mattisの定理 (1962)

- 有限サイズの二部格子上で定義されたハイゼンベルグ模型の基底状態に関する定理
 - 全スピンが相互作用でつながった、任意の二部格子について成り立つ
 - 格子点上のスピンの大きさに制限なし
- Marshall-Lieb-Mattis の定理
 - 基底状態の全スピンの大きさは $|S_A - S_B|$ である。ここで S_A と S_B はそれぞれの副格子上の各スピンの大きさの和
 - 全スピンの大きさがそれより大きな固有状態のエネルギーは基底状態よりもかならず大きい
 - 同じ副格子間のスピン相関関数は必ず正、異なる副格子間では必ず負
- 例) スpinの大きさが均一で、それぞれの副格子の格子点数が等しい場合
 - 基底状態はかならず $S=0$ (スpin一重項)

フェリ磁性 (Lieb-Mattis型フェリ)

- 二部格子反強磁性ハイゼンベルグ模型で各部分格子のスピンの大きさが異なる場合

- 例) A 部分格子 $S=1/2$ 、B 部分格子 $S=1$ の場合

$$S_A=N/4, S_B=N/2 \Rightarrow \text{基底状態 } S=N/4 \text{ (Marshall-Lieb-Mattis)}$$

- $M=0$ の基底状態について

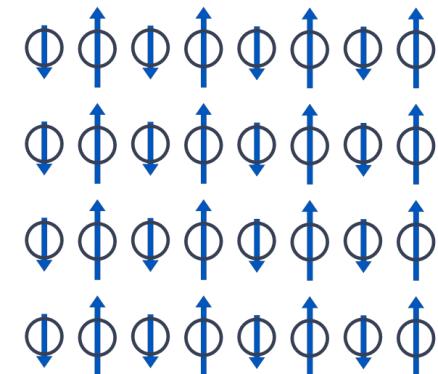
- 強磁性秩序

$$m^2 = \left\langle \left[\frac{1}{N} \sum S_i^x \right]^2 \right\rangle = \frac{1}{2N^2} \left\langle \left[\sum \mathbf{S}_i \right]^2 \right\rangle \rightarrow \frac{1}{32}$$

- 反強磁性秩序

$$m_s^2 = \frac{1}{N} \sum_j (-1)^{i-j} \langle S_i^x S_j^x \rangle \geq \frac{1}{N} \sum_j \langle S_i^x S_j^x \rangle = m^2 > 0$$

- 強磁性秩序と反強磁性秩序が共存



$S=1/2$ 反強磁性鎖 (一次元)

- 一様な最近接相互作用の場合
- 厳密解(Bethe ansatz)から以下が証明されている
 - 基底状態は熱力学的極限でただ一つ
 - 基底状態の上にエネルギーギャップはない
 - 基底状態での相関関数は距離に反比例してべき的に減衰する
- いわゆる “Luttinger 液体”

エネルギーギャップをもつハイゼンベルグ模型

- ・古典スピン模型の基底状態は無限に縮退し、ギャップレス
- ・量子系では有限個の基底状態の上に有限のギャップがある例が知られている
 - ・ボンド交替鎖
 - ・整数スピン鎖・AKLT模型
 - ・J1-J2ジグザグスピン鎖・Majumdar-Ghosh模型
 - ・磁化プラトー
 - ・二次元直交ダイマー系・Shastry-Sutherland模型

Lieb-Schultz-Mattis の定理 (1961)

- 系を一様にひねり、低励起状態が作れるかどうかを見る
- 唯一の基底状態の上に有限のギャップが残るための必要条件を与える
- Lieb-Schultz-Mattis の定理
 - ハミルトニアンが並進対称性をもつ
 - 全スピンの z 成分が保存量 (ハミルトニアンと可換)
 - ハミルトニアンが空間反転に対して不变
 - 有限系の基底状態が唯一かつ $S_z = 0$
- このとき以下が成り立つ
 - 単位胞注のスピンの大きさの和を S とすると、 S が整数でないならば、熱力学的極限で、ギャップレスの励起状態が存在するか、基底状態に縮退が存在
 - 唯一の基底状態の上に有限のギャップが残るには S は整数でなければならない

Lieb-Schultz-Mattis のひねり演算子

- ひねり演算子 (ユニタリ変換)

$$U = \prod_j^L U_j = \exp[i \sum_j^L \theta_j S_j^z] \quad \theta_j = \frac{2\pi}{L} j$$

- ひねり演算子による基底状態の変換 $|\Psi_t\rangle = U|\Psi_0\rangle$

- エネルギーの増加量

$$\delta E = \langle \Psi_t | \mathcal{H} | \Psi_t \rangle - \langle \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | [U^{-1} \mathcal{H} U - \mathcal{H}] | \Psi_0 \rangle = \mathcal{O}(L^{-1})$$

- ひねった状態との基底状態の直交性

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \Psi_t \rangle &= \langle \Psi_0 | U | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | T^{-1} U T | \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | U \exp[-i \frac{2\pi}{L} \sum_j S_j^z] \exp[2\pi i S_1^z] | \Psi_0 \rangle \end{aligned}$$

- 全 $S_z = 0$ かつ S が半奇数の場合には2つの状態は直交

Lieb-Schultz-Mattis の定理の帰結

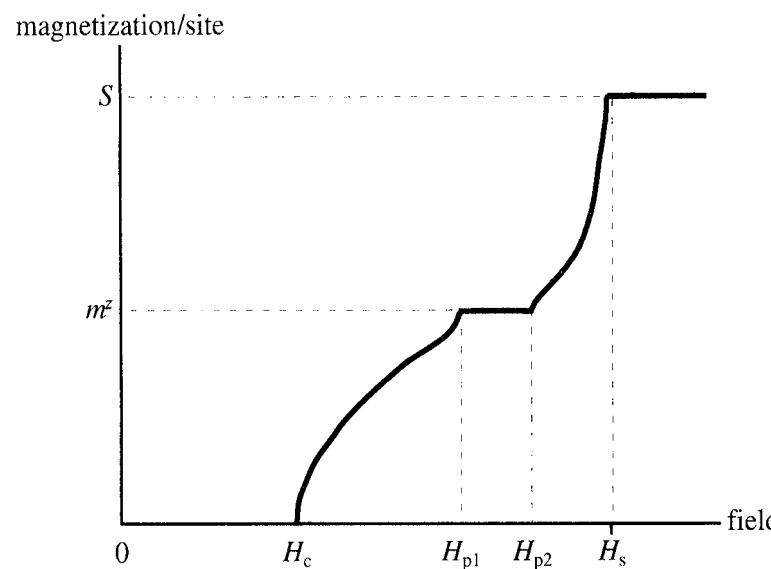
- ・反強磁性ハイゼンベルグ鎖 : S が半奇数の場合にはギャップレス or 多重縮退。 S が整数の場合にはギャップが開いても良い
- ・ボンド交替反強磁性鎖 : 単位胞が 2 倍 \Rightarrow ギャップが開いても良い
- ・J1-J2ジグザグスピン鎖 : もとの基底状態が Marshall-Lieb-Mattis の前提条件(二部格子)を満たさないため、Lieb-Schultz-Mattis はそのままでは適用不可
- ・二次元系 : ある特定の方向にひねった場合 \Rightarrow エネルギー増加 = $O(1)$
- ・有限磁化への拡張 : Oshikawa-Yamanaka-Affleck (1997)
- ・数値計算の援用 : Nakamura-Todo (2002)

Oshikawa-Yamanaka-Affleck の定理 (1997)

- Lieb-Schlutz-Mattis の定理の有限磁化(全 $S_z = M$)への拡張

$$(1 - \exp[-2\pi i \frac{M}{L}] \exp[2\pi i S]) \langle \Psi_0 | \Psi_t \rangle = 0$$

- S が半奇数の時 : M/L が半奇数でない限り $\langle \Psi_0 | \Psi_t \rangle = 0$
- S が整数の時 : M/L が整数でない限り $\langle \Psi_0 | \Psi_t \rangle = 0$
- まとめると、磁化プラトーの出現条件: $S - M/L$ が整数

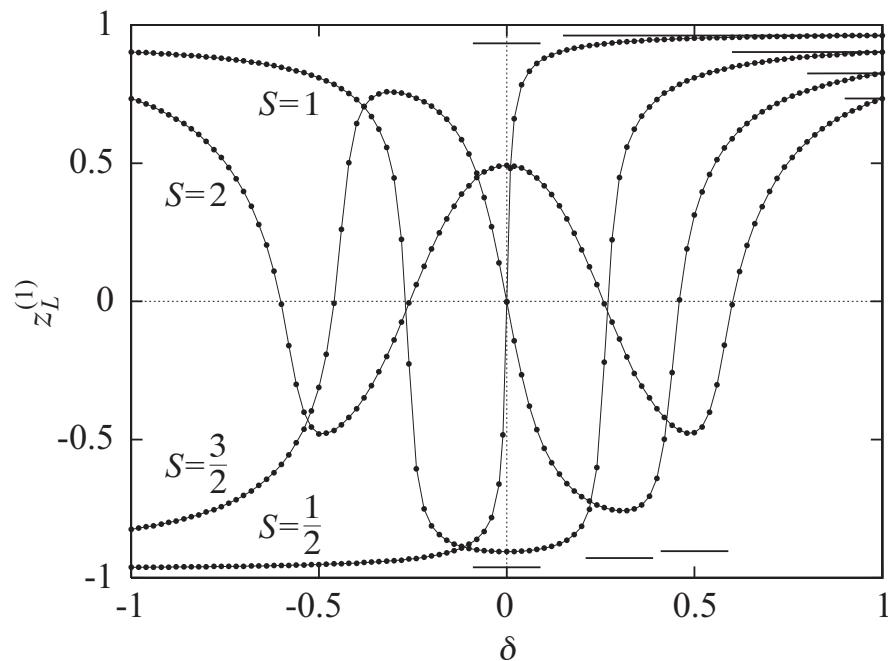


ひねり演算子の期待値の計算

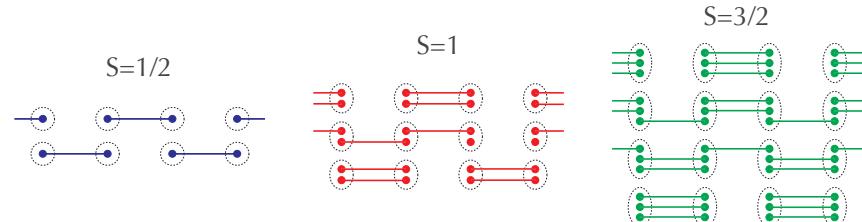
- ひねった状態と基底状態の重なり積分は、基底状態におけるひねり演算子の期待値として計算できる。Nakamura-Todo (2002)

$$z_L = \langle \Psi_0 | \Psi_t \rangle = \langle \Psi_0 | U | \Psi_0 \rangle$$

- スピン S ボンド交替鎖への応用 (量子モンテカルロによる数値計算)

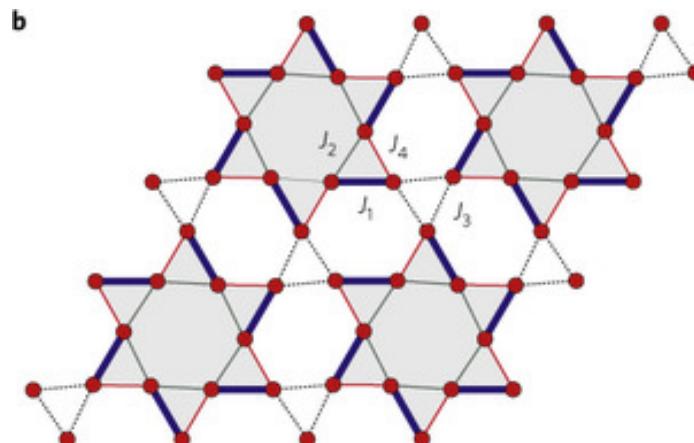


$$\mathcal{H} = \sum_i [1 - (-1)^i \delta] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$$



Valence-Bond-Solid (VBS) 状態

- 多くの非磁性基底状態($S=0$)が VBS 描像(あるいは valence-bond-crystal とも呼ばれる)で説明できる
 - J_1-J_2 ジグザグスピン鎖
 - 整数スピン反強磁性鎖 (Haldane 予想)
 - ボンド交替反強磁性鎖
 - 二次元直交ダイマー系 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$
 - 厳密な基底状態波動関数が書き下せる場合も多い



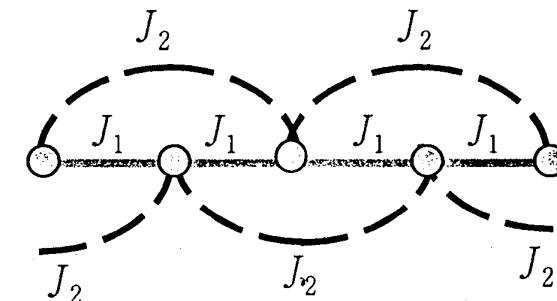
J_1 - J_2 ジグザグスピニン鎖

- $S=1/2$ フラストレートスピニン模型

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + J_2 \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+2}$$

- $J_2/J_1 < 0.2411$ では Luttinger 液体
- $J_2/J_1 > 0.2411$ では、基底状態は二重縮退 (並進対称性が自発的に破れる)
- $J_2/J_1 = 1/2$ の時は、厳密な基底状態波動関数が求まる (Majumdar-Ghosh模型)

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{J}{2} \sum_j (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} + \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+2} + \mathbf{S}_{j+1} \cdot \mathbf{S}_{j+2}) \\ &= \frac{J}{4} \sum_j [(\mathbf{S}_j + \mathbf{S}_{j+1} + \mathbf{S}_{j+2})^2 - \frac{9}{4}] \\ &= \frac{J}{4} \sum_j [3P_{i,i+1,i+2}^{3/2} - \frac{3}{2}]\end{aligned}$$



Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki 模型 (1988)

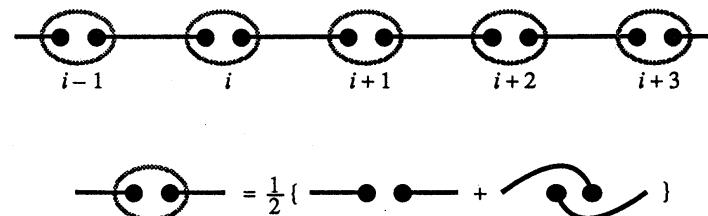
- 双二次 (biquadratic) 相互作用をもつ $S=1$ 反強磁性スピン鎖

$$\mathcal{H} = \sum_j [\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} + \frac{1}{3}(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^2]$$

- このハミルトニアンも $S=2$ への射影演算子を使って書き直せる

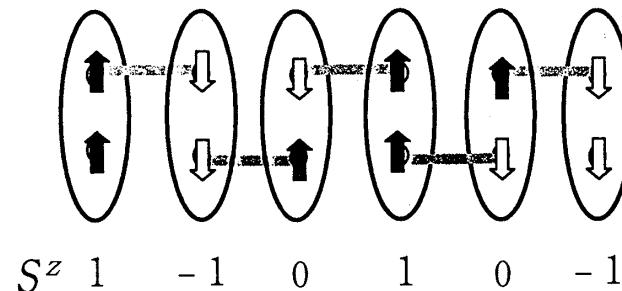
$$\mathcal{H} = \sum_j [2P_{j,j+1}^2 - \frac{2}{3}]$$

- 最低エネルギー状態を作るには、隣りあった格子点の合計スピンが常に 1 以下になるような波動関数を考えれば良い ⇒ AKLT 波動関数



隠れた秩序と String 秩序パラメタ

- $S_z=0$ を除いて考えると、反強磁性的長距離秩序が見える！



- String 秩序パラメタが有限の値を持つ

$$\mathcal{O}_{\text{str}} = \lim_{\ell \rightarrow \infty} S_0^z \exp \left[\pi i \sum_{k=1}^{2\ell-1} S_k^z \right] S_{2\ell}^z$$

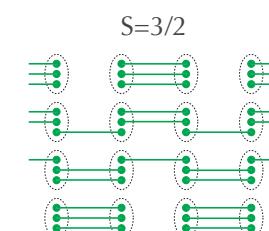
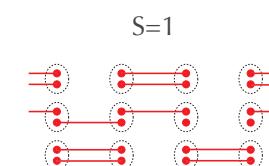
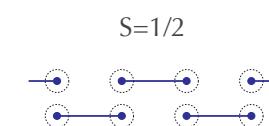
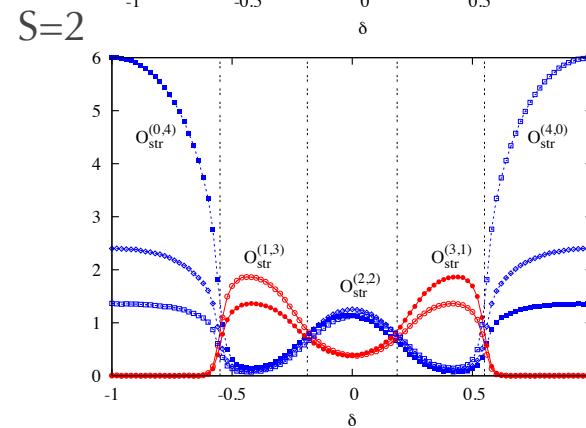
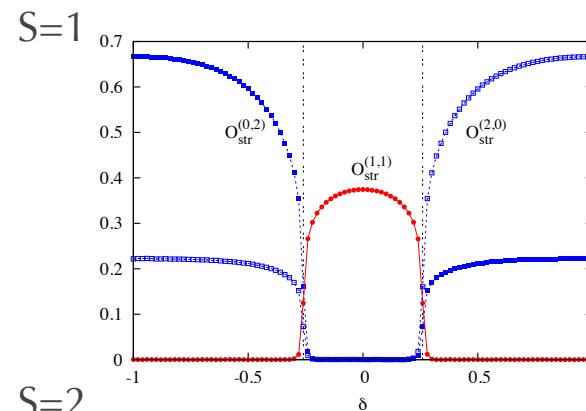
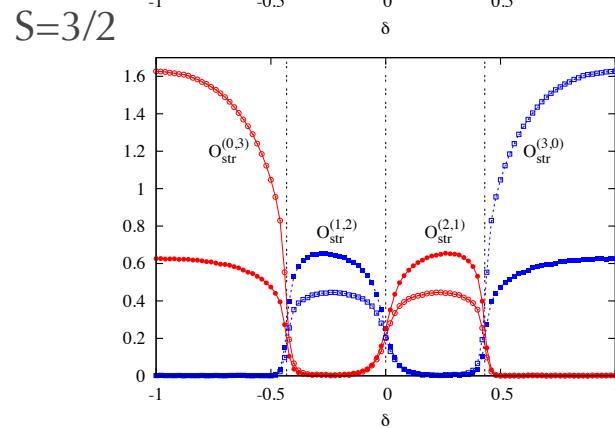
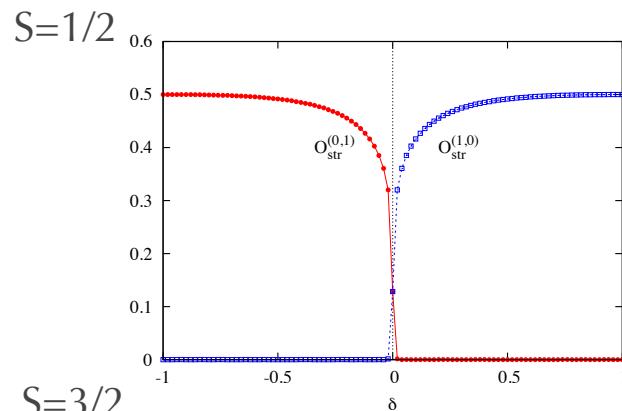
- AKLT 模型では $-4/9$
- $S=1$ bilinear chain では -0.3743

大きな S ・ボンド交替系への拡張

- 一般化された string 積序パラメタ

$$\mathcal{O}_{\text{str}}^{(m,n)} = \lim_{\ell \rightarrow \infty} (iS_0^z)^{\textcolor{red}{m}} \exp \left[\pi i \sum_{k=1}^{2\ell-1} S_k^z \right] (iS_{2\ell}^z)^{\textcolor{red}{n}}$$

- 数値計算の結果

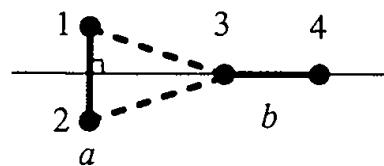


Haldane ギャップの数値検証

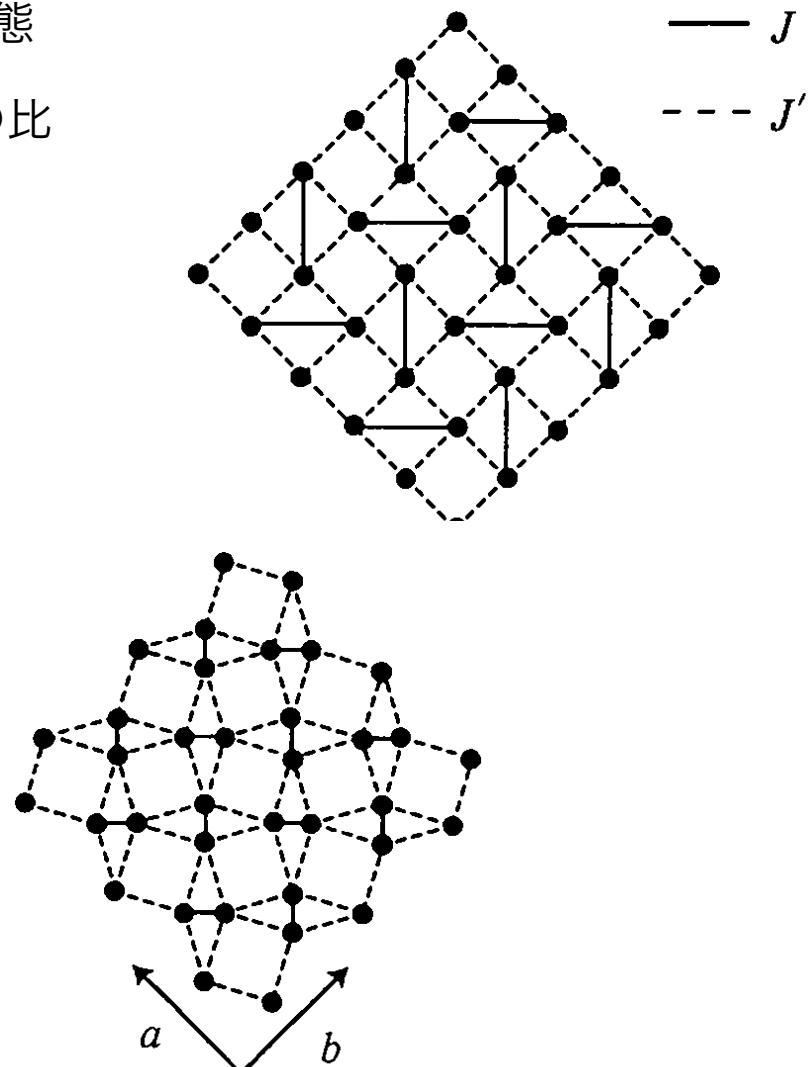
	Δ	ξ	手法
S=1	0.413(7)		MCPM (Nightingale-Blöte 1986)
	0.4150(2)	6.03(2)	DMRG (White-Huse 1992)
	0.41049(2)	6.2	ED (Golinelli et al 1994)
	0.408(12)		QMC (Yamamoto 1995)
	0.41048(6)	6.0164(2)	QMC loop (Todo-Kato 2001)
S=2	0.074(16)		QMC (Yamamoto 1995)
	0.055(15)		DMRG (Nishiyama et al 1995)
	0.085(5)	49(1)	DMRG (Schollwöck-Jolicœur 1995)
	0.090(5)	50(1)	QMC+loop (Kim et al 1997)
	0.0876(13)		DMRG (Wang et al 1999)
	0.08916(5)	49.49(1)	QMC loop (Todo-Kato 2001)
S=3	0.01002(3)	637(1)	QMC parallel loop (Todo-Kato 2001)
S=4	0.000799(5)	10400(70)	QMC parallel loop (Matsuo-Todo 2011)

直交ダイマー系 Shastry-Sutherland 模型

- ・2次元フラストレート系における厳密な基底状態
- ・ J ボンドにダイマーがのった波動関数は J'/J の比によらず厳密な固有状態
- ・ $J'/J < 0.7$ では基底状態 (数値計算結果)
- ・固有状態であることの証明



$$J'(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{S}_3 |s\rangle_a |s\rangle_b = 0$$



講義 「スピン物性物理」 第13回

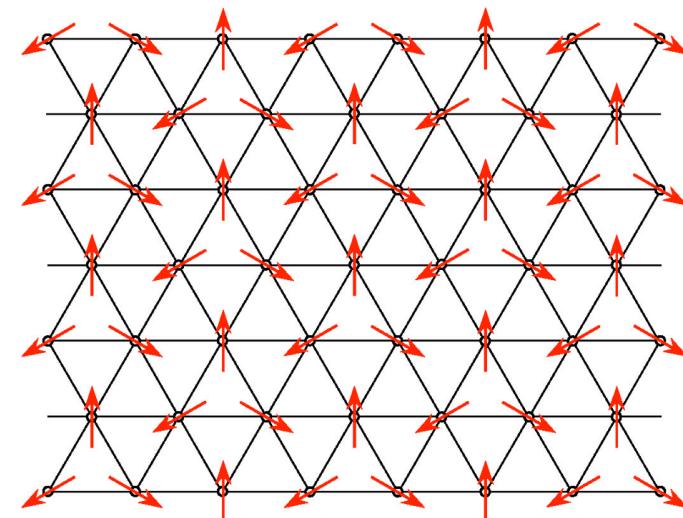
- 相転移と臨界現象
 - 二次元反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態
 - 古典ハイゼンベルグ模型の基底状態
 - 平均場近似
 - スピン波近似
 - 擬一次元、擬二次元系における相転移

二次元反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態

- ・正方格子：ネール状態
- ・三角格子：フラストレーション \Rightarrow 120度構造



- ・どちらも回転対称性・並進対称性の破れた状態
- ・ $S=1/2$ では量子ゆらぎのため少し縮んでいる
- ・厳密な証明はない(正方格子 $S > 1/2$ を除き)
 - ・数値計算(対角化・QMC)により確かめられている



古典ハイゼンベルグ模型の基底状態

- ・スピンを長さ S の古典ベクトルと考える

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle j,k \rangle} J_{j,k} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k$$

- ・フーリエ変換 $\mathbf{S}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \mathbf{S}_j e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_j}$ を導入すると

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}) \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}) |\mathbf{S}_{\mathbf{q}}|^2 \quad J(\mathbf{q}) = \sum_k J_{j,k} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)}$$

- ・一方、それぞれの格子点上で $\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{p}+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_j} = S^2$ なので

$$\sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_j = NS^2 = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{S}_{\mathbf{q}}|^2$$

- ・この条件のもとでエネルギーを最小化するには、 $J(\mathbf{q})$ が最小値をとるような $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ において $|\mathbf{S}_{\mathbf{Q}}|^2 = \frac{1}{2} NS^2$ 、他の \mathbf{q} で $\mathbf{S}_{\mathbf{q}} = 0$ とすれば良い

スパイラルスピン構造

- さらに任意の j について以下の式がなりたつためには

$$\frac{1}{N}(2\mathbf{S}_Q \cdot \mathbf{S}_{-Q} + \mathbf{S}_Q \cdot \mathbf{S}_Q e^{2i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} + \mathbf{S}_{-Q} \cdot \mathbf{S}_{-Q} e^{-2i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j}) = S^2$$

- $\mathbf{S}_Q \cdot \mathbf{S}_Q = \mathbf{S}_{-Q} \cdot \mathbf{S}_{-Q} = 0$ あるいは互いに直交する単位ベクトル R, I を用いて

$$\mathbf{S}_Q = \frac{\sqrt{N}}{2} S [\mathbf{R} + i \mathbf{I}]$$

- 基底状態エネルギー $E = J(Q)|\mathbf{S}_Q|^2 = \frac{1}{2} N S^2 J(Q)$

- 各格子点におけるスピンの向き $\mathbf{S}_j = S [\mathbf{R} \cos Q \cdot \mathbf{r}_j - \mathbf{I} \sin Q \cdot \mathbf{r}_j]$

- Q に垂直な面内ではスピンは同じ向き、 Q 方向に進むと一定角度で回転

⇒ スパイラル構造

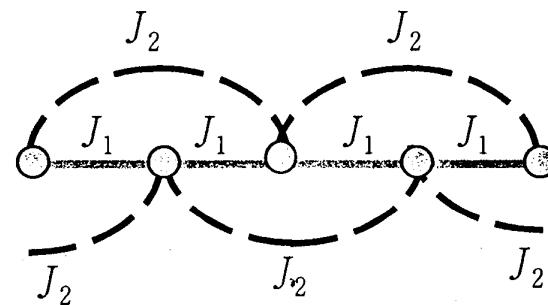
- d 次元超立方格子の場合 $J(\mathbf{q}) = J \sum_{n=1}^d \cos q_n$

一次元 J_1 - J_2 模型 (古典)

$$J(\mathbf{q}) = J_1 \cos \theta + J_2 \cos 2\theta$$

- $|J_2| > |J_1|/4$ でヘリカル構造

$$\cos \Theta = -\frac{J_1}{4J_2}$$



- cf) 量子系 ($S=1/2$) の場合はまったく異なる
 - $J_2 < 0.2411J_1$: TL流体 (臨界的)
 - $J_2 > 0.2411J_1$: ダイマー状態 (VBS, 二重縮退)

平均場近似

- 基底状態がスパイラル構造をもつ場合

$$\mathbf{S}_j = S [\mathbf{R} \cos \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j - \mathbf{I} \sin \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j]$$

- 有限温度における磁化も同様にスパイラル構造と仮定する

$$\langle \mathbf{S}_j \rangle_T = m(T) [\mathbf{R} \cos \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j - \mathbf{I} \sin \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j]$$

- 平均場近似

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle j,k \rangle} J_{j,k} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k \approx \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \left(\sum_k J_{j,k} \langle \mathbf{S}_k \rangle_T \right)$$

- 有効場 H_{eff} 中の单ースピンの問題に帰着

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= - \sum_k J_{j,k} \langle \mathbf{S}_k \rangle_T = -m(T) \sum_k J_{j,k} [\mathbf{R} \cos \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_k - \mathbf{I} \sin \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_k] \\ &= -m(T) J(\mathbf{Q}) [\mathbf{R} \cos \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j - \mathbf{I} \sin \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j] \end{aligned}$$

- 有効場は仮定したスピンの向きと同じ

自己無撞着方程式

- 磁場中の古典ハイゼンベルグスピン

$$\langle S^z \rangle_T = S(\cot \beta SH - \frac{1}{\beta SH}) \simeq \frac{\beta S^2 H}{3}$$

- 有効場の表式を代入

$$m(T) = \frac{\beta S^2}{3} \times (-m(T)J(\mathbf{Q}))$$

- 有限の磁化があらわれる温度 (臨界点) $T_c = -\frac{S^2 J(\mathbf{Q})}{3}$

- 臨界温度より高温における帶磁率

- 弱い外部磁場を z 軸方向にかけると $H_{\text{eff}} = H - J(0)\langle S^z \rangle_T$

$$m = \frac{S^2}{3T + S^2 J(0)} H = \frac{S^2}{3} \frac{1}{T - \Theta} H$$

- Weiss 温度 $\Theta = -\frac{S^2 J(0)}{3} < T_c$ ($\mathbf{Q} \neq 0$)

- 臨界点で帶磁率は有限 (除く強磁性)

量子ゆらぎ・温度ゆらぎの効果

- 平均場近似の範囲では、次元によらず常に $T_c > 0$
 - 実際にはハイゼンベルグ模型の場合、二次元では $T_c = 0$ (Mermin-Wagner の定理)
- ゆらぎの効果が無視されている
 - 長波長の低励起状態 (スピン波)
 - 量子ゆらぎ (特に反強磁性の場合)
- ゆらぎを取り込む近似手法
 - スピン波近似 (Holstein-Primakoff の方法)
 - グリーン関数の方法 (Tyablikov の切断)



強磁性体に対するスピン波近似

- Holstein-Primakoff の方法

- 演算子 $n_j = S - S_j^z$ を導入 (固有値 $n = 0, 1, 2 \dots 2S$)

- さらにボゾン生成消滅演算子を導入

$$a_j^\dagger |n_j\rangle = \sqrt{n_j + 1} |n_j + 1\rangle, \quad a_j |n_j\rangle = \sqrt{n_j} |n_j - 1\rangle, \quad [a_j^\dagger, a_j] = n_j$$

- ボゾン数演算子の固有状態にスピン昇降演算子を作用させてみる

$$S_j^+ |n_j\rangle = \sqrt{S(S+1) - S_j^z(S_j^z + 1)} |n_j - 1\rangle = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j |n_j\rangle$$

- スピン量子数 S が大きい時、 $1/S$ に関して展開すると

$$S_j^+ = \sqrt{2S} a_j - \sqrt{2S} \left(\frac{1}{4S}\right) a_j^\dagger a_j a_j + \dots$$

$$S_j^- = \sqrt{2S} a_j^\dagger - \sqrt{2S} \left(\frac{1}{4S}\right) a_j^\dagger a_j^\dagger a_j + \dots$$

スピン波近似(つづき)

- ・ハミルトニアンをボゾン生成消滅演算子の2次まで展開

$$\mathcal{H} = \sum_{j,k} J_{j,k} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k \approx \sum_{j,k} J_{j,k} \left\{ S^2 - S(n_j + n_k) + S(a_j^\dagger a_k + a_k^\dagger a_j) \right\}$$

- ・フーリエ変換 $a_\mathbf{q}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j a_j^\dagger e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$, $a_\mathbf{q} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j a_j e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$ を導入して

$$\mathcal{H} \approx E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \{J(\mathbf{q}) - J(0)\} S a_\mathbf{q}^\dagger a_\mathbf{q} = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_\mathbf{q} a_\mathbf{q}^\dagger a_\mathbf{q}$$

- ・独立した調和振動子(相互作用のないボゾン系)
 - ・ボゾン = 量子化されたスピン波(マグノン $S_z=1$)
 - ・マグノンの分散関係: $\hbar \omega_\mathbf{q} = (J(\mathbf{q}) - J(0))S \sim q^2$
 - ・この近似は $S \gg 1$ 、かつボゾンの密度が低い場合に正当化される
 - ・ $1/S$ の高次の項 ⇒ スピン波間の相互作用

スピン波近似(つづき)

- 波数 \mathbf{q} をもつマグノンの数の期待値

$$\langle n_q \rangle = \frac{1}{\exp[\hbar\beta\omega_q] - 1}$$

- 状態密度

$$g(\mathbf{q})d\mathbf{q} \sim q^{d-1}dq \sim \omega^{(d-2)/2}d\omega$$

- 低温における総マグノン数の期待値

$$\sum_q \langle n_q \rangle \simeq \int_0^\infty \frac{g(\omega)d\omega}{\exp(\hbar\beta\omega) - 1} = (\hbar\beta)^{-d/2} \int_0^\infty \frac{x^{(d-2)/2}dx}{e^x - 1}$$

- 内部エネルギーや比熱、磁化の低温における温度依存性が計算できる
- 三次元の場合：比熱 $C \sim T^{3/2}$ 磁化 $m \sim S(1 - aT^{3/2})$
- 一次元($d=1$)、二次元($d=2$)においては積分が発散 \Rightarrow 有限温度では強磁性状態は不安定

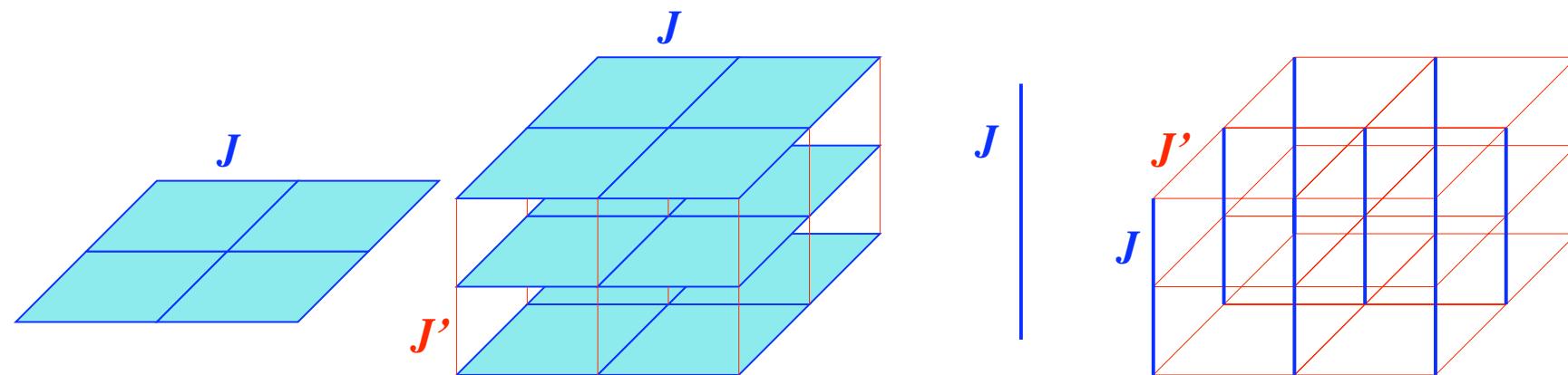
反強磁性体に対するスピン波近似

- 古典的なネール状態(基底状態ではない)から出発
- A, B 副格子それぞれに違うボゾンを導入
- 二種類のボゾンの間の相互作用が入ってくる
 - \Rightarrow Bogoliubov 変換により対角化
- 基底状態に対する $1/S$ の補正が入ってくる：基底状態エネルギー、基底状態磁化
 - 量子ゆらぎによるスピンの縮みを定性的に正しく表現
 - 一次元では反強磁性状態は不安定
 - スピン分散関係 $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \sim q$ (線形)

擬一次元、擬二次元系

- ・実際の物質においては、必ず鎖間あるいは面間に弱い相互作用が存在する
 - ・擬一次元、あるいは擬二次元系とよばれる
 - ・弱い相互作用のため、低温では長距離秩序があらわれる
 - ・弱い鎖間、面間相互作用の効果を平均場として取り入れる

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{H}_{\text{eff}} \quad \mathbf{H}_{\text{eff}} = zJm$$

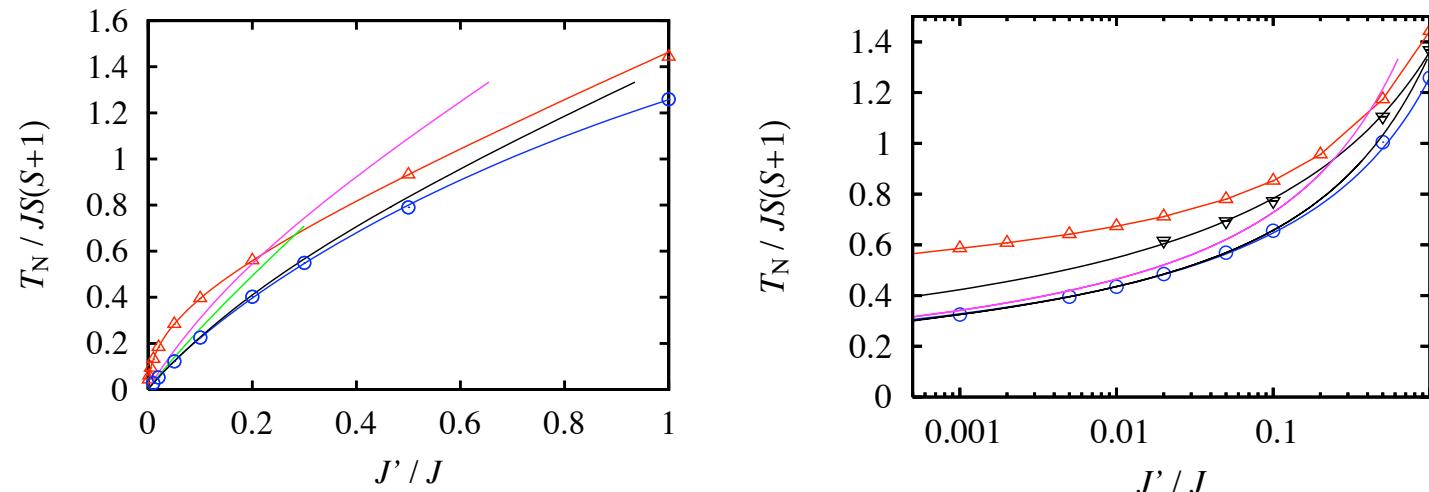


鎖間・面間平均場

- 純粹な一次元・二次元系の帶磁率 $\chi_0(T)$ が求まっているとする。
- その時、三次元系の磁化は $m \simeq \chi_0(T)(H + H_{\text{eff}}) = \chi_0(T)(H + zJ'm)$

$$m = \frac{\chi_0(T)}{1 - zJ'\chi_0(T)} H$$

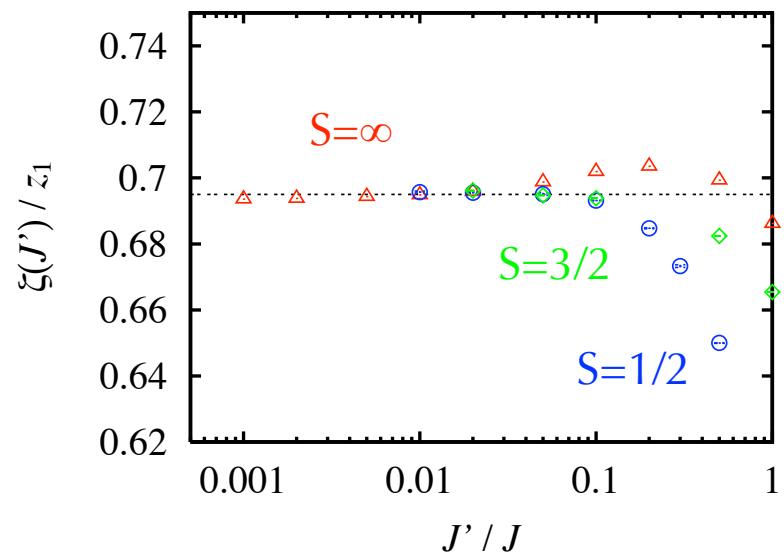
- $zJ'\chi_0(T) = 1$ となる温度で帶磁率は発散 \Rightarrow 相転移 (鎖間・面間平均場)



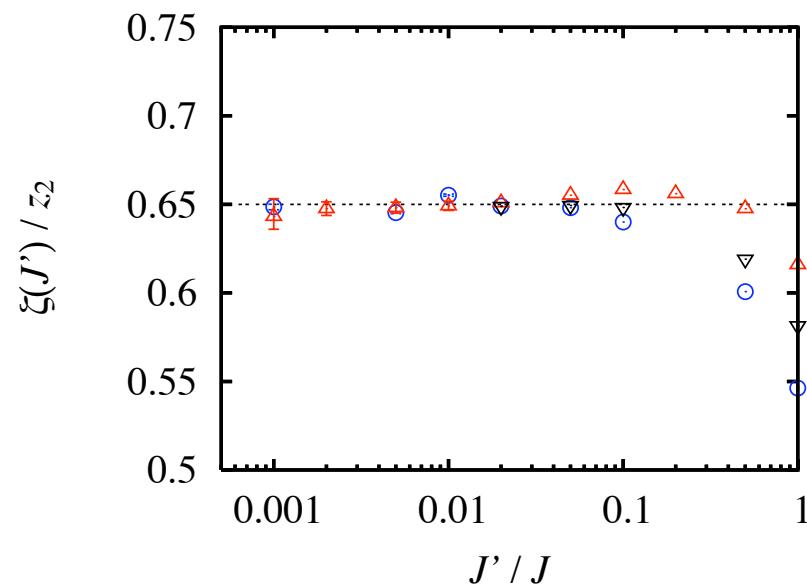
- 実際には $z = 4$ あるいは 2 ではなく、それぞれ ~ 2.8 、 1.3 とした式が S の大きさによらずよく成り立つ (修正平均場 Yasuda, Todo, et al (2005))

有効配位数

$$\zeta(J') \equiv \frac{1}{J' \chi_s^{1D}(T_N(J'))}$$



擬一次元



擬二次元

講義 「スピン物性物理」 第14回

- 実験技術としての計算機シミュレーション
 - 物性物理におけるシミュレーション手法
 - 数値対角化
 - モンテカルロ法の基礎
 - 量子モンテカルロ法
 - ALPSシミュレーションパッケージ

物性物理におけるシミュレーション手法

- Hartree-Fock法
- 密度汎関数法 (density functional theory)
 - 経験的なパラメタを含まない：「第一原理計算」
 - 相関・ゆらぎが強い場合には破綻
- モデル計算
 - 有効模型(ハイゼンベルグ模型など)に対する計算手法
 - 相関・ゆらぎの効果を正確に取り入れた大規模計算が可能：「第一原理的」
 - 数値対角化(厳密対角化) (ED)
 - 古典モンテカルロ法 (MC)
 - 量子モンテカルロ法 (QMC)
 - 分子動力学法 (MD)
 - 密度行列くりこみ群 (DMRG)
 - 動的平均場近似 (DMFT)

数値対角化

- 有限の大きさの系のハミルトニアンを行列の形で書き下し、数値的に対角化
- 例：ハイゼンベルグ模型

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle j,k \rangle} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k = J \sum_{\langle j,k \rangle} \left[S_j^z S_k^z + \frac{1}{2} (S_j^+ S_k^- + S_j^- S_k^+) \right]$$

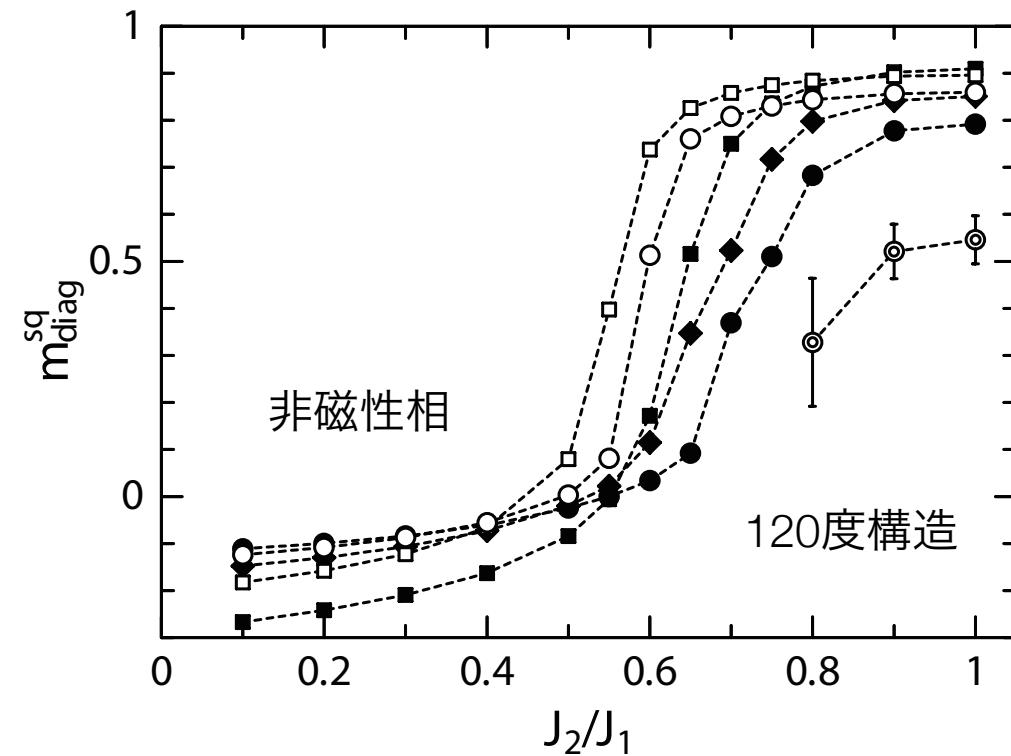
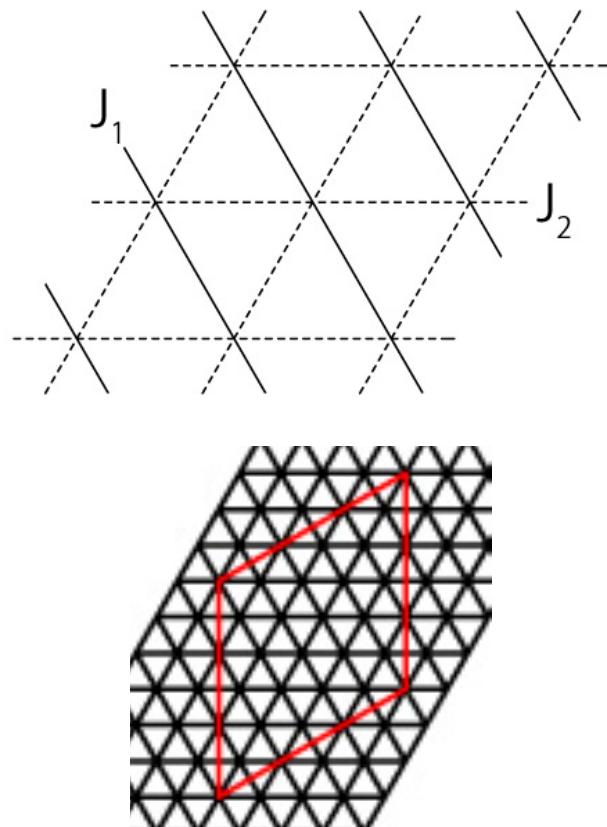
- スピン数 $N \Rightarrow$ 行列のサイズ $(2S+1)^N \times (2S+1)^N$
- 例： $S=1/2, N=20 \Rightarrow$ 行列のサイズ $1048576 \times 1048576 \Rightarrow$ メモリ 8TB
- どうやって対角化するか
 - 完全対角化：Householder法（三重対角化）+ QR分解など（LAPACKなどを使う）
 - 計算量が行列の次元の3乗に比例
 - スピンを1つ増やすと、次元は2倍、メモリは4倍、計算時間は8倍!

数値対角化における計算上の工夫

- 行列のサイズを小さくする
 - 保存量(ハミルトニアンと可換な量)を使う (total momentum, total S, etc)
 - ハミルトニアンは保存量毎にブロック対角化。それを独立に対角化
 - 例 : total Sz $\Rightarrow N=20$ の系で total Sz=0 の部分空間の次元
$${}_{20}C_{10} = \frac{20!}{10! 10!} = 184\,756 \ll 2^{20} = 1\,048\,576$$
- 全固有値・固有ベクトルではなく、基底状態と低励起状態だけを求める
 - ハミルトニアン行列はかなり「疎」(1行/1列の非零要素の数 ~ ボンド数)
 - べき乗法の利用 : $\mathcal{H}^n v \rightarrow \Psi_0$ (絶対値最大の固有ベクトルに収束)
 - 行列の非零要素のみ保存、あるいは行列要素をその場で計算
 - べき乗法の改良 : Lanczos法、CG (共役勾配)法

超大規模数値対角化の例 (Nakano et al 2013)

- ・(歪んだ)三角格子 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルグ模型
- ・ $N=27 \Rightarrow$ 次元 712 070 156 203 \Rightarrow メモリ 15TB (情報基盤センター FX10 4400ノード)



モンテカルロ法の種類と応用

- モンテカルロ積分
 - 単純サンプリング, 重点的サンプリング
- マルコフ連鎖モンテカルロ (高次元分布の生成, 人工的な「時系列」の生成)
 - 平衡状態のシミュレーション: 古典系, 世界線量子モンテカルロ
クラスターアルゴリズム, 拡張アンサンブル法
 - 非平衡状態, ダイナミクス, 基底状態の探索(焼き鈍し法)
- 逐次モンテカルロ
 - 転送行列モンテカルロ, グリーン関数モンテカルロ
- 格子 QCD, タンパク質の折り畳み, 組み合わせ最適化問題, ベイズ推定, 生態系, 金融工学, 在庫管理, 交通流, etc

マルコフ連鎖モンテカルロ法

- ・任意の分布(ボルツマン分布など)に従う状態変数を確率的に生成
- ・非常に多数の繰り返しを行う (計算機利用が必須)
- ・多次元・多自由度の系を近似・バイアスなしに「厳密に」扱うことが可能
(統計誤差, 有限サイズ効果を除く)
- ・臨界現象など多自由度であることが本質的に重要な問題に特に有用
- ・現実に忠実な模型の扱いに問題のあることも (負符号問題)
 - ・系の本質的な部分のみを抽出した「有効格子模型」を扱うことが多い
 - ・その基本原理は非常に簡単 (物理的背景はあまりない)
 - ・物理現象以外にも幅広い問題に応用可能

調和ポテンシャル中の古典粒子

- ポテンシャルエネルギー

$$V(x) = x^2$$

- ボルツマン分布

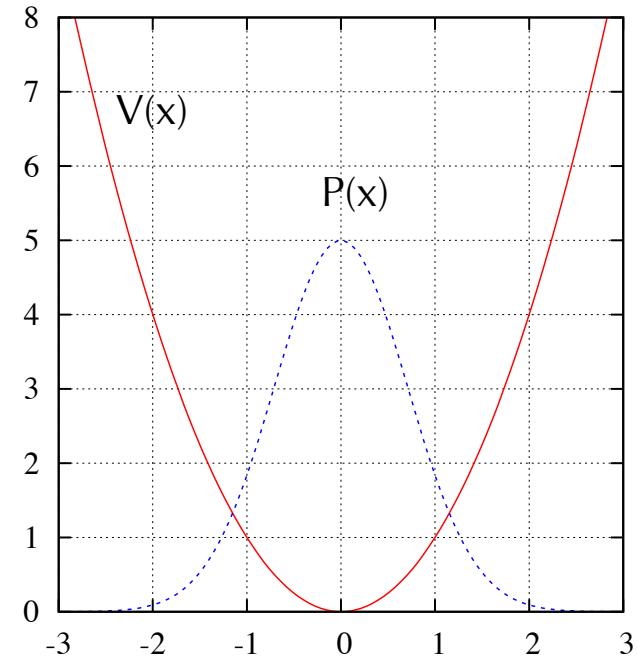
$$P(x) = \frac{e^{-\beta V(x)}}{\int e^{-\beta V(x)} dx}$$

- 物理量の期待値

$$\langle x \rangle = \frac{\int x e^{-\beta V(x)} dx}{\int e^{-\beta V(x)} dx}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int x^2 e^{-\beta V(x)} dx}{\int e^{-\beta V(x)} dx}$$

- 配位 (configuration): x 一般には多次元である (以後 \mathbf{k} と書く)
- 逆温度 β が大きいと被積分関数の分散が非常に大きい → 重点的サンプリング



マルコフ連鎖モンテカルロ

- マルコフ連鎖モンテカルロ (Markov chain Monte Carlo)
- 動的モンテカルロ (dynamic Monte Carlo) (物理では単に「モンテカルロ」)
- マルコフ連鎖: 確率過程の一種

$$k_1 \rightarrow k_2 \rightarrow k_3 \rightarrow k_4 \rightarrow \dots$$

- 配位が生成される確率は直前の配位にのみ依存
- 遷移確率 (transition probability)

$$T(k \rightarrow \ell) = T^{(\ell)(k)}$$

- 遷移行列 (transition matrix) T は一般に非常に巨大な行列 (実際に目で見ることは不可能)

- 遷移行列が満たすべき条件

- 確率であるための条件 $0 \leq T^{(\ell)(k)} \leq 1$

- 確率保存 $\sum_{\ell} T^{(\ell)(k)} = 1$

- さらに次の2つ条件が満たされていると仮定

- エルゴード性 (ergodicity): ある自然数が存在して $(T^n)^{(\ell)(k)} > 0$

- つりあいの条件 (balance condition) $\sum_k T^{(\ell)(k)} e^{-\beta E^{(k)}} = e^{-\beta E^{(k)}}$

平衡分布

$$P_{\text{eq}} = \begin{pmatrix} e^{-\beta E^{(1)}} \\ e^{-\beta E^{(2)}} \\ \vdots \\ e^{-\beta E^{(N)}} \end{pmatrix}$$

が遷移行列 T の固有値 1 の右固有ベクトル

- Perron-Frobeniusの定理から、唯一の定常分布(=平衡分布)に収束する

詳細つりあいの条件

- 実際には「つりあいの条件」よりもさらに厳しい「詳細つりあいの条件 (detailed balance condition)」を課すことが多い

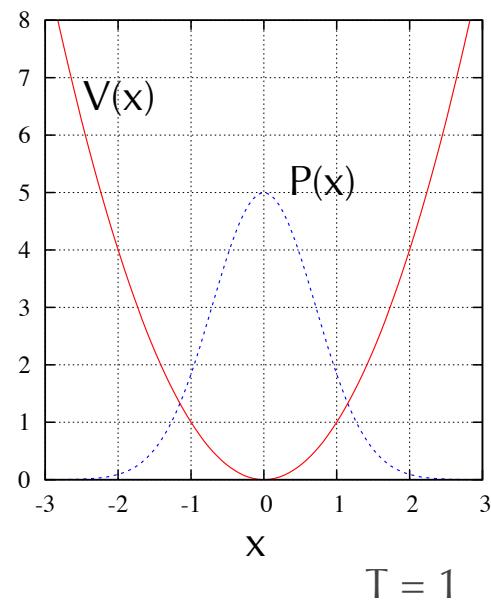
$$T^{(\ell)(k)} e^{-\beta E^{(k)}} = T^{(k)(\ell)} e^{-\beta E^{(\ell)}}$$

- 両辺を k について和をとると「つりあいの条件」に帰着する
- 「詳細つりあいの条件」は「つりあいの条件」の十分条件
- c.f. 「詳細つりあいを満たさないモンテカルロ法」
H. Suwa and S. Todo, PRL 105, 120603 (2010)
諏訪、藤堂、日本物理学会誌 66, 370 (2011)

調和ポテンシャル中の古典粒子

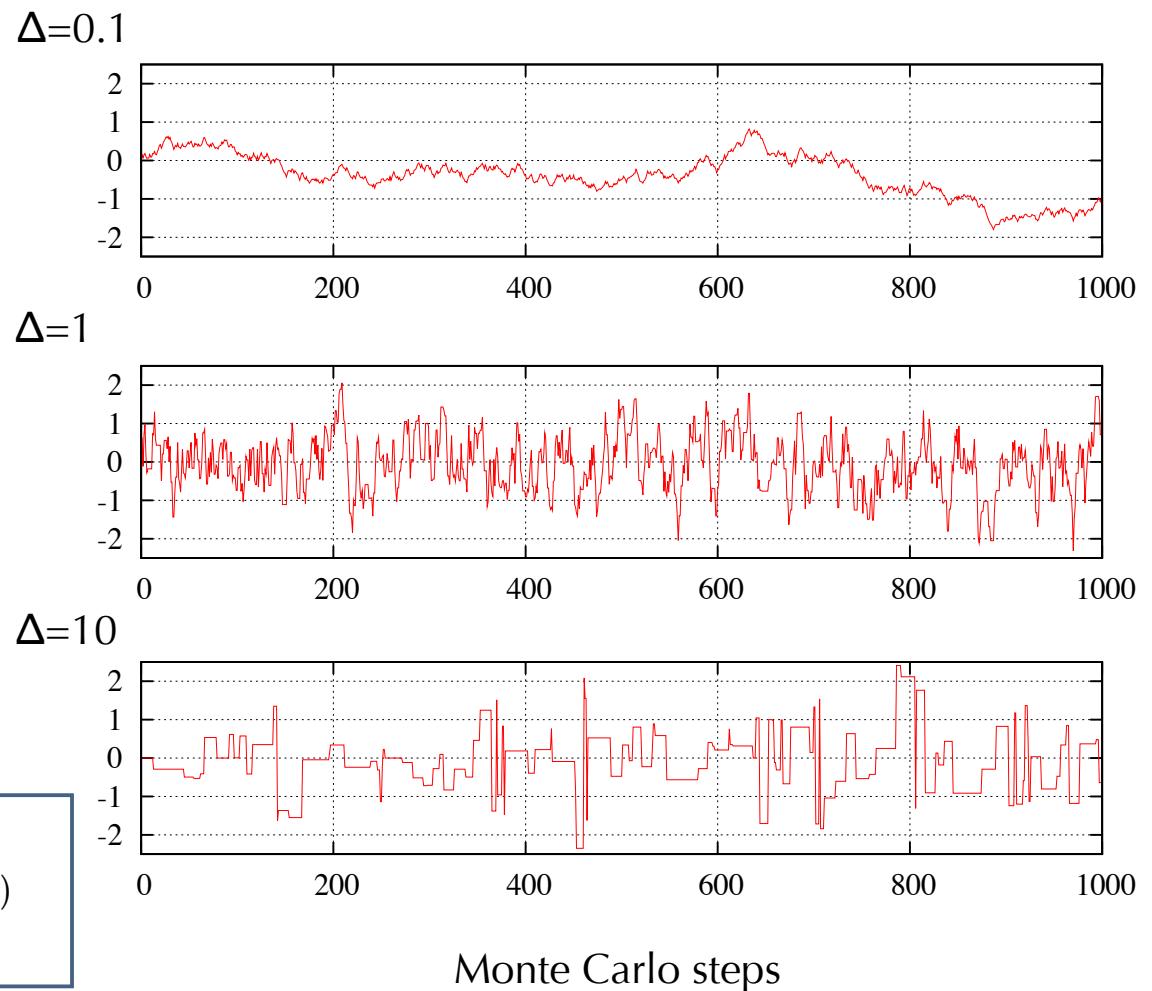
- マルコフ連鎖モンテカルロ法
 - 現在の配位 x について試行配位 (trial configuration) x' を $x - \Delta \sim x + \Delta$ の一様分布から選ぶ
 - 確率 $\min\left(1, \frac{e^{-\beta V(x')}}{e^{-\beta V(x)}}\right)$ で x' を採択(accept), 棄却(reject)された場合にはもとの x のまま
 - 物理量の測定 (reject された場合にもカウントする)
 - 採択確率 (acceptance probability) は $\frac{e^{-\beta V(x')}}{e^{-\beta V(x)} + e^{-\beta V(x')}}$ でもよい

Single particle in a harmonic trap



Metropolis algorithm

```
trial = x + delta*(2*random()-1);
if (random() < exp(-(V(trial)-V(x))))
    x = trial;
```



イジング模型 Ising Model

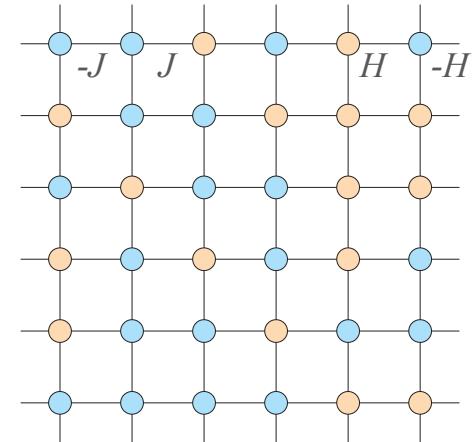
- 格子上に規則的に並んだ磁気モーメント(スピン) $\sigma_i = \pm 1$
- ハミルトニアン Hamiltonian $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i$
- 分配関数 partition function

$$Z = \sum_k e^{-\beta E^{(k)}}$$

- 状態 k の出現確率 = ボルツマン重み $e^{-\beta E^{(k)}}$
- 物理量 physical quantities

- ギブス自由エネルギー Gibbs free energy $f = -\frac{1}{N\beta} \ln Z$
- 内部エネルギー internal energy

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} Z = \frac{\sum_k E^{(k)} e^{-\beta E^{(k)}}}{Z}$$



- 比熱 specific heat

$$C = \frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial T} = -\frac{\beta^2}{N} \frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{\beta^2}{N} (\langle (E^{(k)})^2 \rangle_{\text{MC}} - (\langle E^{(k)} \rangle_{\text{MC}})^2)$$

- 磁化 magnetization と磁化の二乗 (m は零磁場の下で零)

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sigma_i^{(k)} \right\rangle_{\text{MC}} \quad m^2 = \frac{1}{N^2} \left\langle \left(\sum_i \sigma_i^{(k)} \right)^2 \right\rangle_{\text{MC}}$$

- 帯磁率 magnetic susceptibility

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{\beta}{N} \left\{ \langle \left(\sum_i \sigma_i^{(k)} \right)^2 \rangle_{\text{MC}} - \langle \sum_i \sigma_i^{(k)} \rangle_{\text{MC}}^2 \right\} = N \beta m^2$$

- 相関関数 correlation function

$$G(r) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \sim e^{-r/\xi}$$

- 構造因子 structure factor (相関関数のフーリエ変換) を $q=0$ のまわりで展開

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle e^{-i(r_i - r_j) \cdot q} = \frac{S(0)}{1 + |q|^2 \xi^2} + O(q^4)$$

- 相関長 correlation length

$$\xi = \frac{1}{|q|^2} \sqrt{\frac{S(0)}{S(q)} - 1}$$

イジング模型に対するマルコフ連鎖モンテカルロ

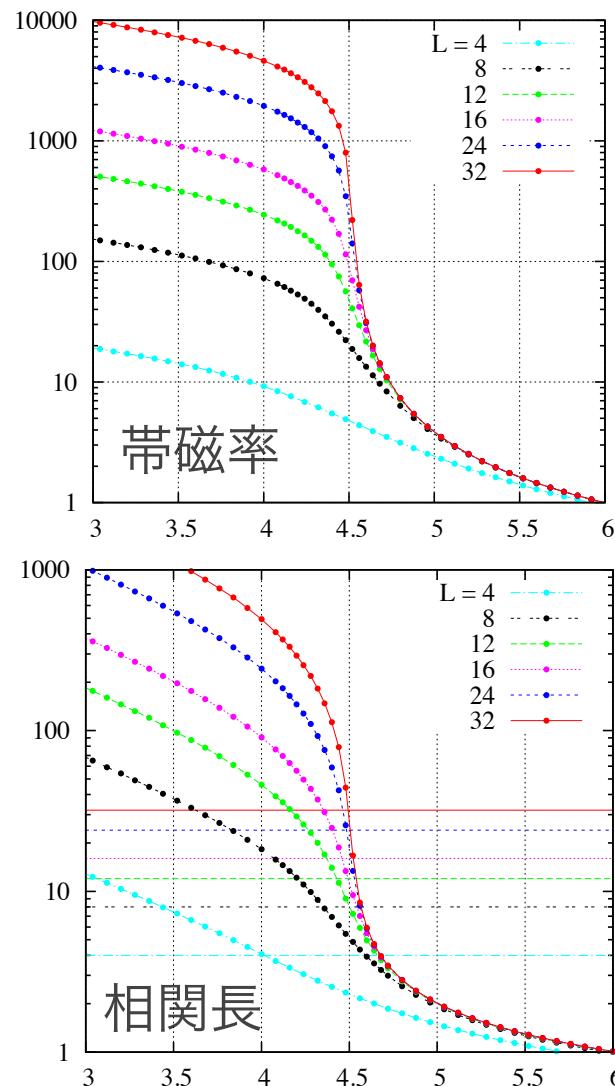
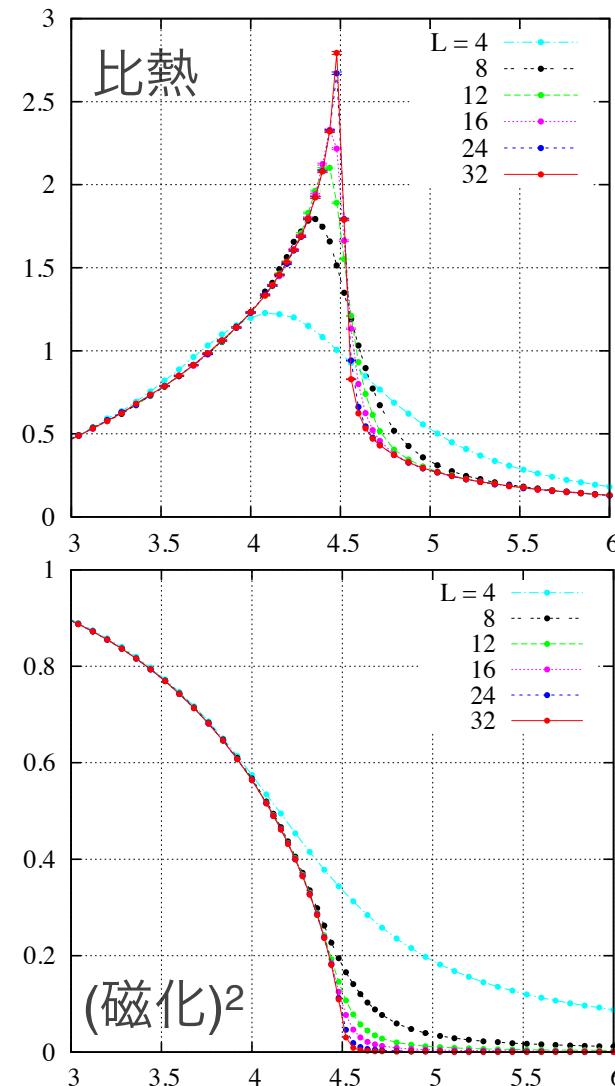
メトロポリス法 Metropolis

```
for (int m = 0; m < total_mcs; ++m) {      // loop over Monte Carlo steps
    for (int s = 0; s < num_sites; ++s) {    // loop over lattice sites
        double delta = 0;
        for (int j = 0; j < num_neighbors; ++j) {
            int v = neighbor(s, j);
            delta += 2 * J * spin[s] * spin[v]; // calculate energy difference
        }
        if (random() < exp(-beta * delta))    // accept/reject trial configuration
            spin[s] = -1 * spin[s];
    }
    // measure physical quantities
}
```

熱浴法 heat bath

```
if (random() < (1 + tanh(-beta * delta / 2)) / 2)
    spin[s] = -1 * spin[s];
```

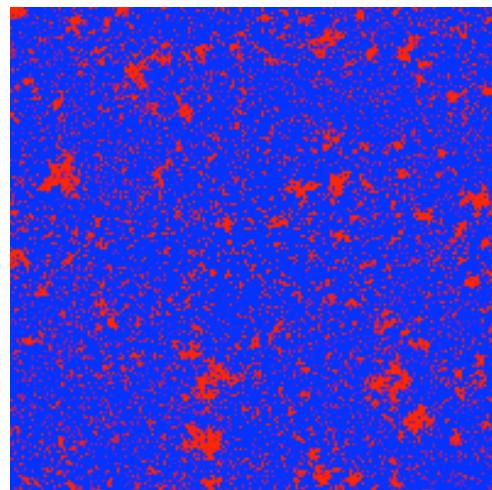
三次元立方格子強磁性イジング模型



イジング模型における相転移 Phase Transition

$$F = E - TS$$

$T=0.995T_c$

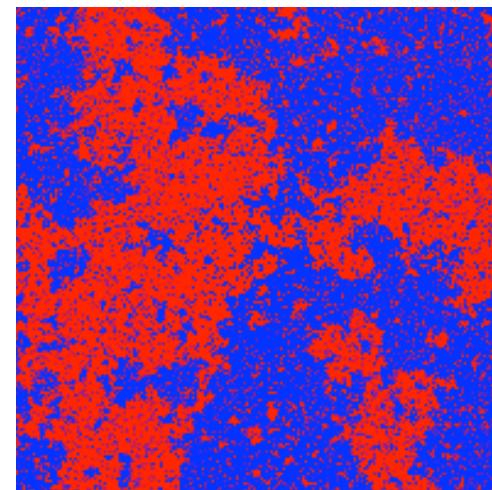


エネルギー利得

秩序状態

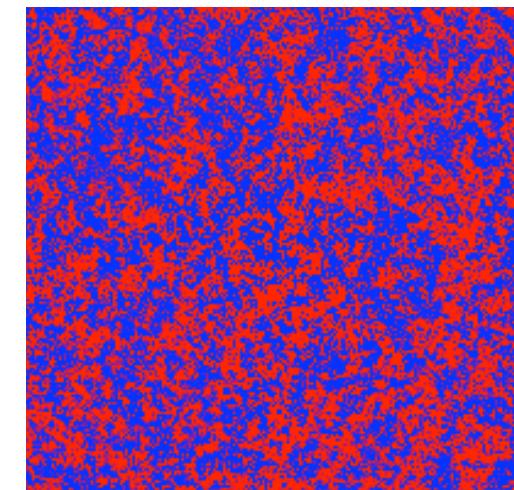
ordered state

$T=T_c$



臨界点 critical point

$T=1.05T_c$



エントロピー利得

無秩序状態

disordered state

量子調和振動子

- ・ハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{K} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2}$$

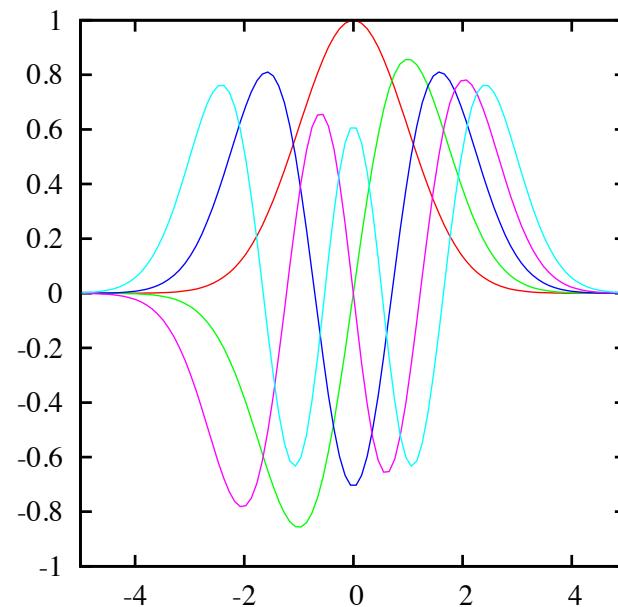
- ・シュレディンガー方程式

$$(-i\hbar \frac{d^2}{dx^2} + \frac{kx^2}{2})\Psi(x) = E\Psi \quad \omega = \sqrt{k/m}$$

- ・固有値と固有関数 $\Psi_n(x)$

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

- ・絶対零度(最低エネルギー状態)でも有限の幅を
持つて分布している(零点振動)



- 量子系の分配関数と物理量の期待値

$$Z = \text{tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

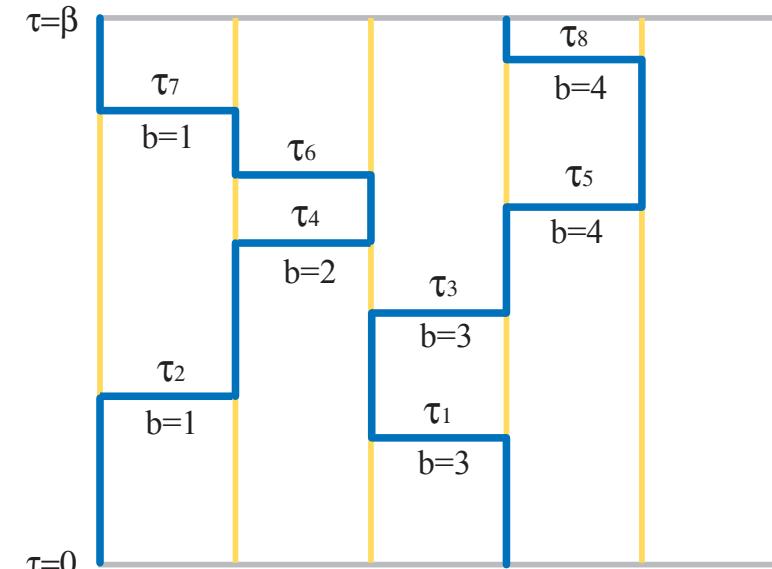
$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr} A e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z}$$

- 量子系では \mathcal{H} , A 等は全て演算子(or 行列)
- モンテカルロ法を使うには物理量の期待値を

$$\langle A \rangle = \sum_c A(c) W(c)$$

の形で書きたい ($A(c)$ も $W(c)$ も c -数)

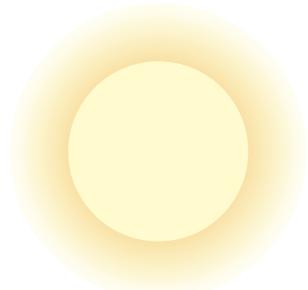
- 量子系の場合の「配位」 c と対応する「重み」 $W(c)$ は何か?
- 経路積分や高温展開を利用して「配位」や「重み」を定義する
表示・表現 (representation)
- メトロポリス法・熱浴法・拡張アンサンブル法・クラスターアルゴリズムの利用



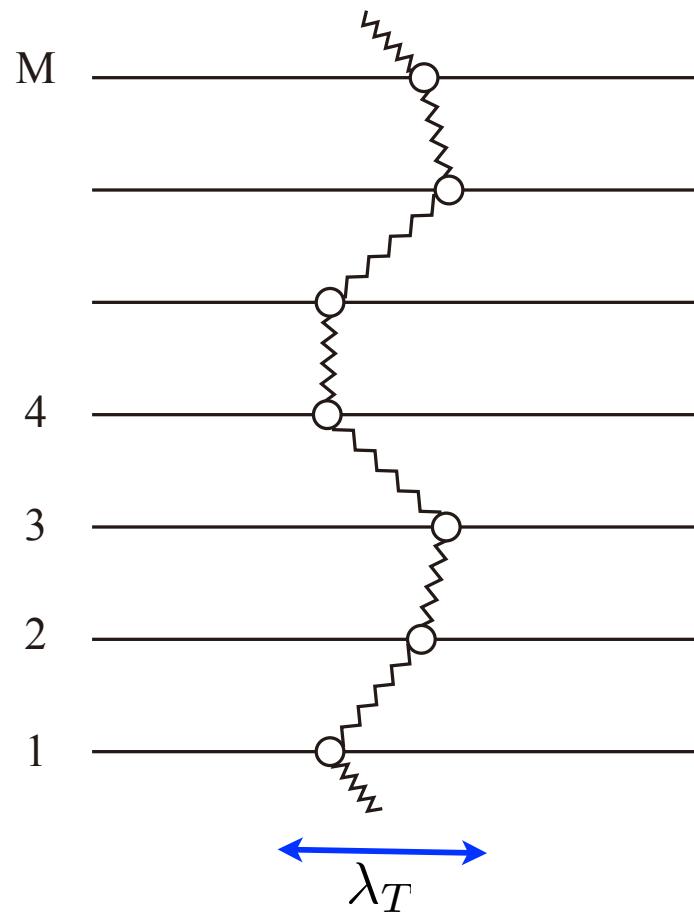
連続虚時間経路積分表示

虚時間経路積分表示

量子1粒子



古典M粒子 (ポリマー)



ポテンシャル中の粒子

$$\mathcal{H} = \hat{K} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

- 分配関数

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\beta \mathcal{H}} | x \rangle = \int dx \langle x | e^{-\beta(\hat{K} + \hat{V})} | x \rangle$$

- 絶対にやってはいけないこと

$$e^{-\beta(\hat{K} + \hat{V})} \Rightarrow e^{-\beta \hat{K}} e^{-\beta \hat{V}}$$

- しかしそのままでは扱えないので、近似を導入：**Suzuki-Trotter 公式**

$$e^{a(A+B)} = e^{\frac{a}{M}(A+B)} = [e^{\frac{a}{M}A} e^{\frac{a}{M}B}]^M + O\left(\frac{a^2}{M}\right)$$

ただし A, B は任意の行列(or 演算子)。Trotter 数 M は整数。

- 分配関数

$$Z = \int dx \langle x | [e^{-\frac{\beta}{M} \hat{K}} e^{-\frac{\beta}{M} \hat{V}}]^M | x \rangle + O(\frac{\beta^2}{M})$$

- 間に完全系 $1 = \int dx |x\rangle\langle x|$ を $M-1$ 個はさむ

$$Z \simeq \int dx_1 dx_2 \cdots dx_M \langle x_1 | e^{-\frac{\beta}{M} \hat{K}} e^{-\frac{\beta}{M} \hat{V}} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{-\frac{\beta}{M} \hat{K}} e^{-\frac{\beta}{M} \hat{V}} | x_3 \rangle \cdots \langle x_M | e^{-\frac{\beta}{M} \hat{K}} e^{-\frac{\beta}{M} \hat{V}} | x_1 \rangle$$

- ここで

$$\langle x | e^{-\frac{\beta}{M} \hat{K}} e^{-\frac{\beta}{M} \hat{V}} | x' \rangle = e^{-\frac{\beta}{M} V(x')} \langle x | e^{-\frac{\beta}{M} \hat{K}} | x' \rangle$$

- さらに p の完全系 $1 = \int dp |p\rangle\langle p|$ をはさむと

$$= e^{-\frac{\beta}{M} V(x')} \int dp \langle x | e^{-\frac{\beta}{M} \frac{\hat{p}^2}{2m}} | p \rangle \langle p | x' \rangle = e^{-\frac{\beta}{M} V(x')} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{-\frac{\beta}{M} \frac{p^2}{2m}} e^{ipx/\hbar} e^{-ipx'/\hbar}$$

- p に関してガウス積分を実行すると

$$= \sqrt{\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta}} e^{-\frac{\beta}{M} V(x')} e^{-\frac{mM}{2\hbar\beta} (x-x')^2}$$

- 虚時間経路積分表示 (imaginary time path integral representation)

$$Z \simeq \left(\frac{mM}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{M/2} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_M \exp \left\{ -\beta \left[\frac{\kappa}{2} \sum_s (x_s - x_{s+1})^2 + \frac{1}{M} \sum_s V(x_s) \right] \right\}$$

- ばね定数 $\kappa = \frac{mM}{2\hbar^2\beta^2}$ でつながった M 個の古典粒子 (ポリマー) の分配関数と等価
- このポリマーのゆらぎの幅(慣性半径)は

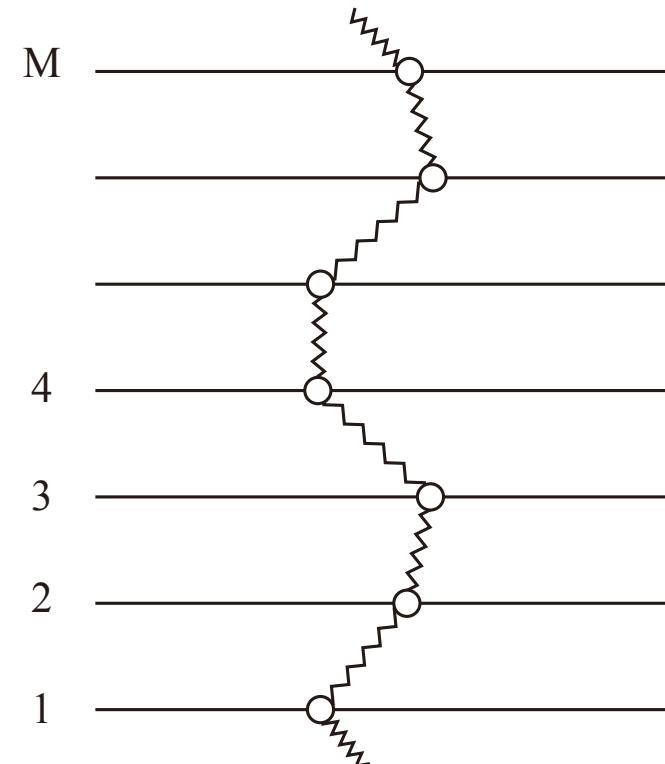
$$R_G^2 = M \langle (x - x')^2 \rangle \sim M \frac{kT}{2} \frac{2}{\kappa} \sim \lambda_T^2$$

(エネルギー等分配則より)

- 熱的ド・ブロイ波長

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{\hbar^2\beta}{2\pi m}}$$

古典極限 ($\hbar \rightarrow 0$) もしくは 高温極限 ($\beta \rightarrow 0$) で
0 になる (古典的な質点に戻る)



- 鈴木-Trotter分解により量子 N 粒子系を古典 M 粒子系にマッピング
(虚時間経路積分表示)
- マップされた古典粒子系に対しては、通常のモンテカルロ法が使える
 - メトロポリス法、熱浴法、拡張アンサンブル法
- 問題点
 - 局所更新では、粒子数が変化しない
 - 局所更新では、巻き付き数(winding number)が変化しない
 - 「エルゴード性の破れ」
 - Trotter数 $M \rightarrow \infty$ の外挿が必要
 - $M \rightarrow \infty$ で粒子数無限(計算量、メモリ量が発散)
 - 粒子間のばね定数無限
 - $M \gg 1$ では緩和が非常に遅くなる
 - 量子格子系の場合には状態が離散的であるという特性を利用して、これらの問題点を全て解決可能

量子格子模型 (quantum lattice models)

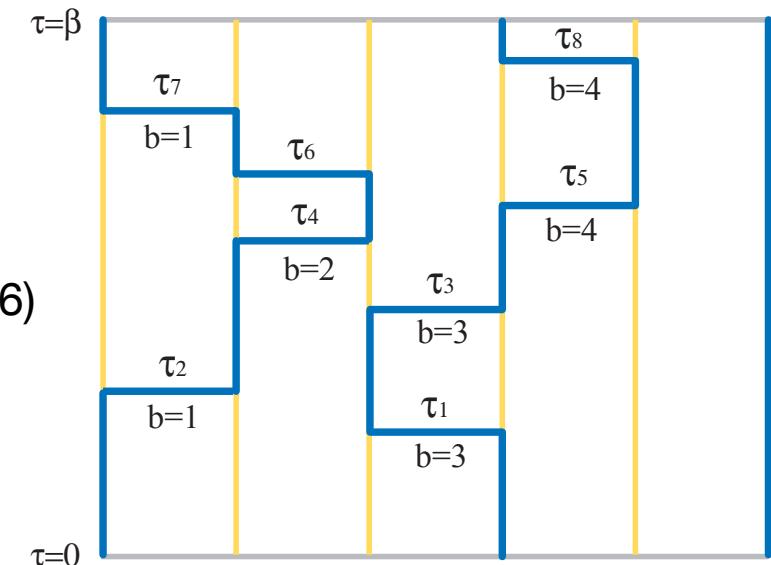
- 量子スピン模型

$$\mathcal{H} = \frac{J^{xy}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J^z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$$

- ハバード模型 (量子格子気体)

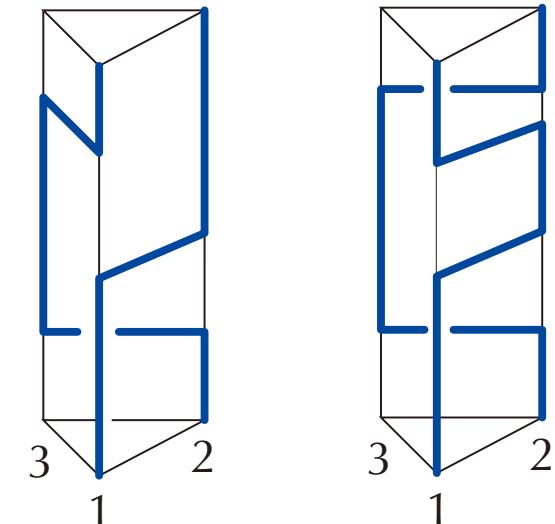
$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- 虚時間経路積分表示が可能 (Suzuki 1976)
- 粒子がジャンプする場所と(虚)時刻だけを覚えて
おけば良い ⇒ 連続虚時間表示 (Beard-Wiese 1996)
- 粒子数は保存 ⇒ 世界線は途中で途切れない



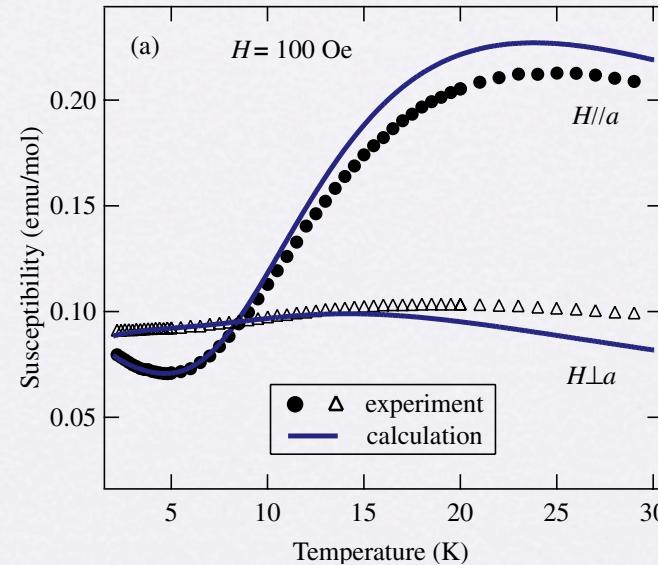
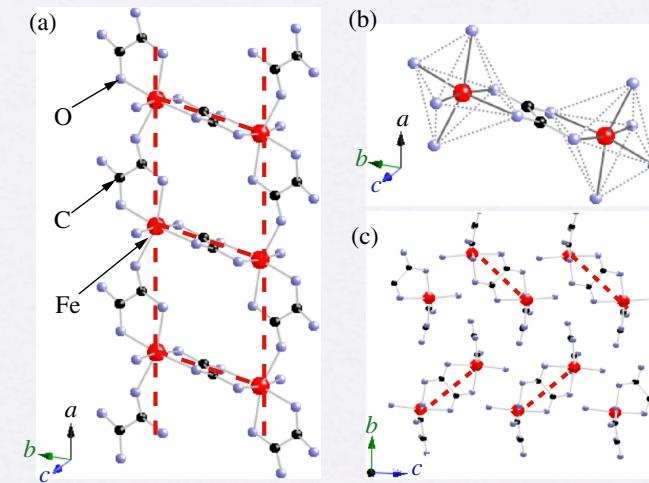
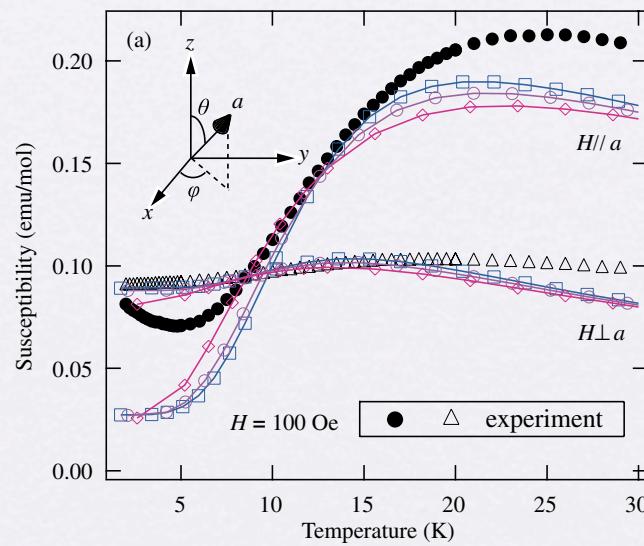
負符号問題 (negative sign problem)

- ・フェルミ粒子は粒子の交換に対して、波動関数の符号が入れ替わる
フェルミ統計・フェルミの排他律
- ・虚時間経路積分表示した際に粒子が交換すると重みが負になる
- ・フラストレーションのある量子スピン模型の場合にも負の重みが現れる
- ・重みが 0 以下になるので、確率として解釈することができない
- ・量子モンテカルロにおける最大の問題！



Spin ladder material $\text{Na}_2\text{Fe}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_2$

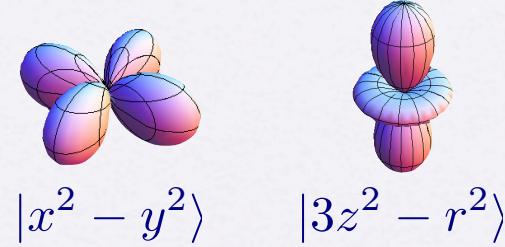
- Fe^{2+} ions in octahedral crystal field
⇒ effective $S=1$ spins at low T
- Fitting experimental data by QMC results for several theoretical models (ladders, dimers, etc)



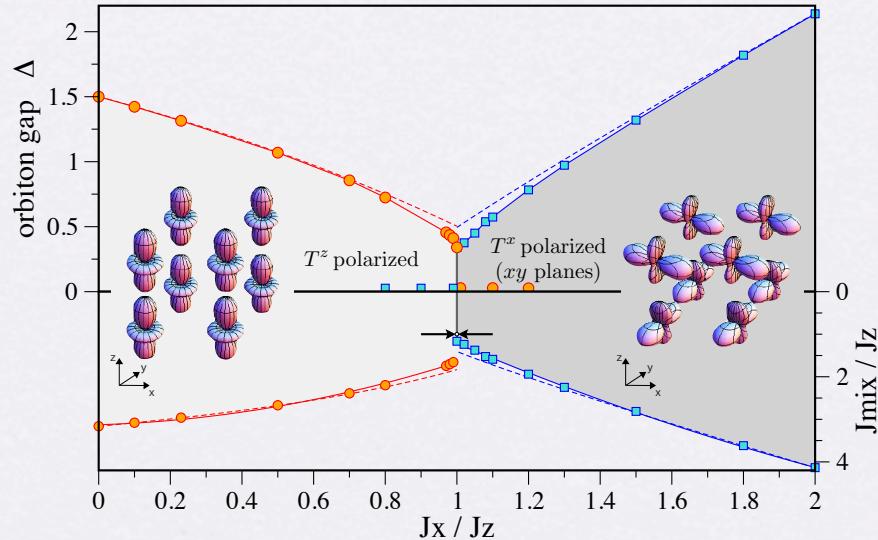
Yamaguchi, Kimura, Honda, Okunishi , Todo, Kindo, Hagiwara (2009)

Orbital ordering in e_g orbital systems

- Mott insulators with partially filled d-shells
- Non-trivial interplay of charge, spin, and orbital degrees of freedom
- Effective Hamiltonian for orbital degrees of freedom (120° model)



$$H_{120} = - \sum_{i,\gamma=x,y} \frac{1}{4} \left[J_z T_i^z T_{i+\gamma}^z + 3J_x T_i^x T_{i+\gamma}^x \right. \\ \left. \pm \sqrt{3} J_{\text{mix}} (T_i^z T_{i+\gamma}^x + T_i^x T_{i+\gamma}^z) \right] - \sum_i J_z T_i^z T_{i+z}^z$$



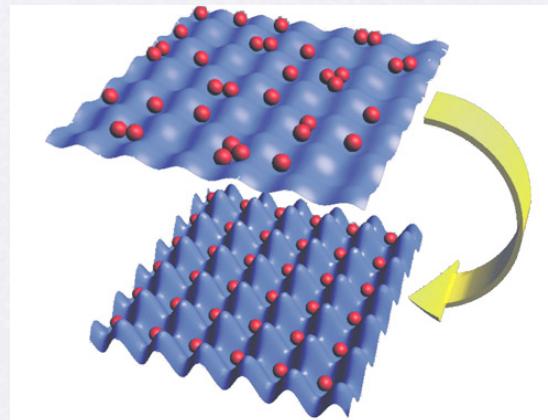
van Rynbach, Todo, Trebst (2010)

Supersolid in extended Bose-Hubbard model

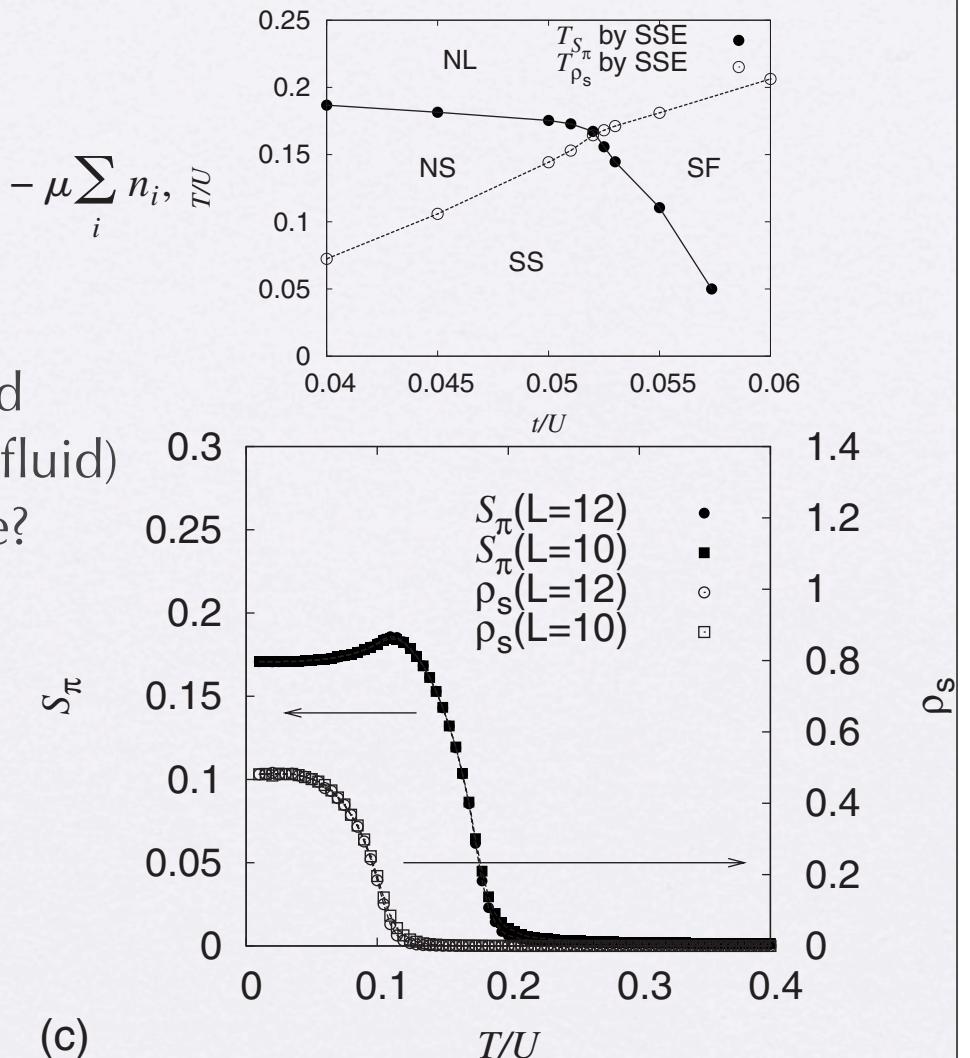
- Interacting soft-core bosons

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \frac{1}{2} U \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad t/U$$

- Supersolid = co-existence of diagonal long-range order (=solid) and off-diagonal long-range order (=superfluid)
- Experimental realization: optical lattice?



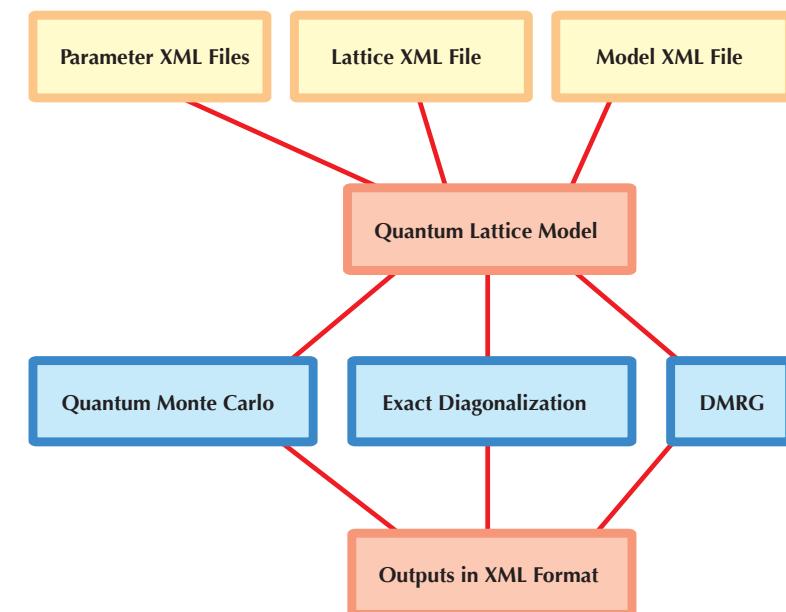
<http://www.uibk.ac.at/th-physik/qo>



Yamamoto, Todo, Miyashita (2009)

ALPS プロジェクト

- <http://alps.comp-phys.org/>
- 量子格子模型(量子スピン系、電子系)のための並列シミュレーションソフトウェアパッケージの開発
- 開発物(ライブラリ・アプリケーション)をフリーウェアとして公開
- 様々な模型に対する様々なシミュレーションアルゴリズムの入力・計算結果を XML 形式で統一的に入出力可能に



The ALPS project

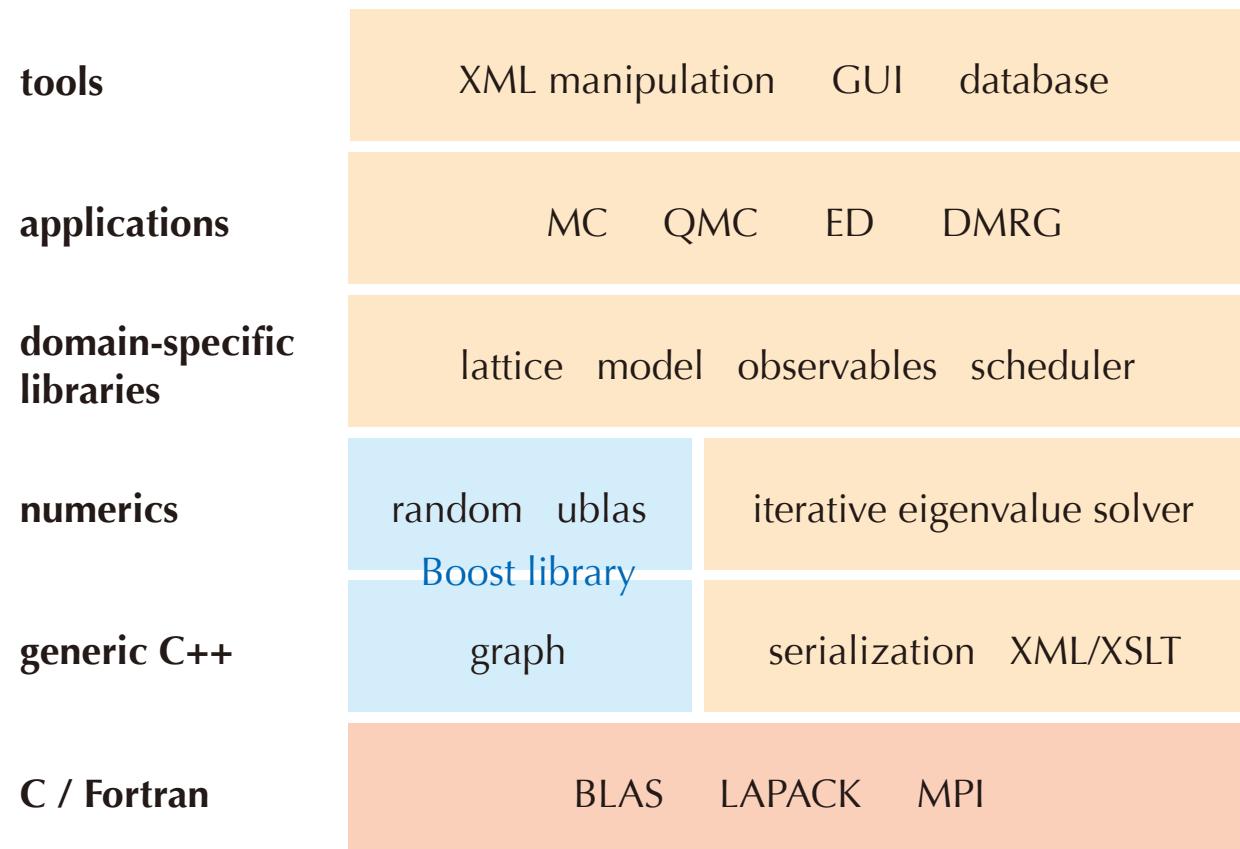
ALPS = Algorithms and Libraries for Physics Simulations

- International collaboration for developing **open-source softwares** for simulation of **quantum lattice models**, such as quantum spin systems, electron systems, etc
- **ALPS Libraries** = collection of **generic C++ libraries**
- **ALPS Applications** = collection of application packages using **modern algorithms** such as QMC, DMRG, ED, etc
- **ALPS Framework** = environment for executing large-scale parallel simulations including XML schemas, tools, scheduler, etc

Target audience

- Experimental physicists
 - Use “canned codes” to model materials
 - Determine microscopic parameters by fitting experimental data to simulations
- Theoretical physicists
 - Quick check of theoretical ideas using many modern algorithms
 - Monte Carlo, Diagonalization, DMRG, ...
 - Also useful for debugging
 - Libraries simplify and accelerate code development

ALPS libraries and applications



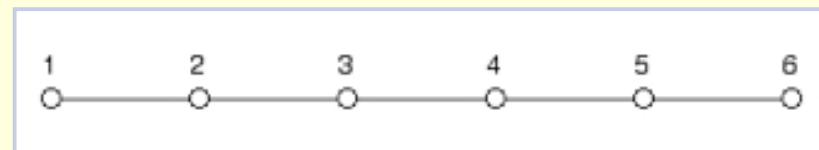
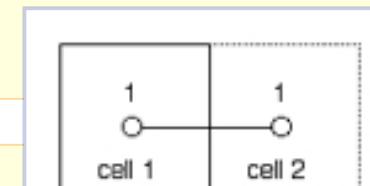
ALPS Lattice XML

periodic chain with length L

```
<LATTICE name="chain lattice" dimension="1">
  <BASIS><VECTOR> 1 </VECTOR></BASIS>
</LATTICE>
```

```
<UNITCELL name="simple1d" dimension="1" vertices="1">
  <EDGE>
    <SOURCE vertex="1" offset="0"/><TARGET vertex="1" offset="1"/>
  </EDGE>
</UNITCELL>
```

```
<LATTICEGRAPH name = "chain lattice">
  <FINITELATTICE>
    <LATTICE ref="chain lattice"/>
    <PARAMETER name="L"/>
    <EXTENT size ="L"/>
    <BOUNDARY type="periodic"/>
  </FINITELATTICE>
  <UNITCELL ref="simple1d"/>
</LATTICEGRAPH>
```



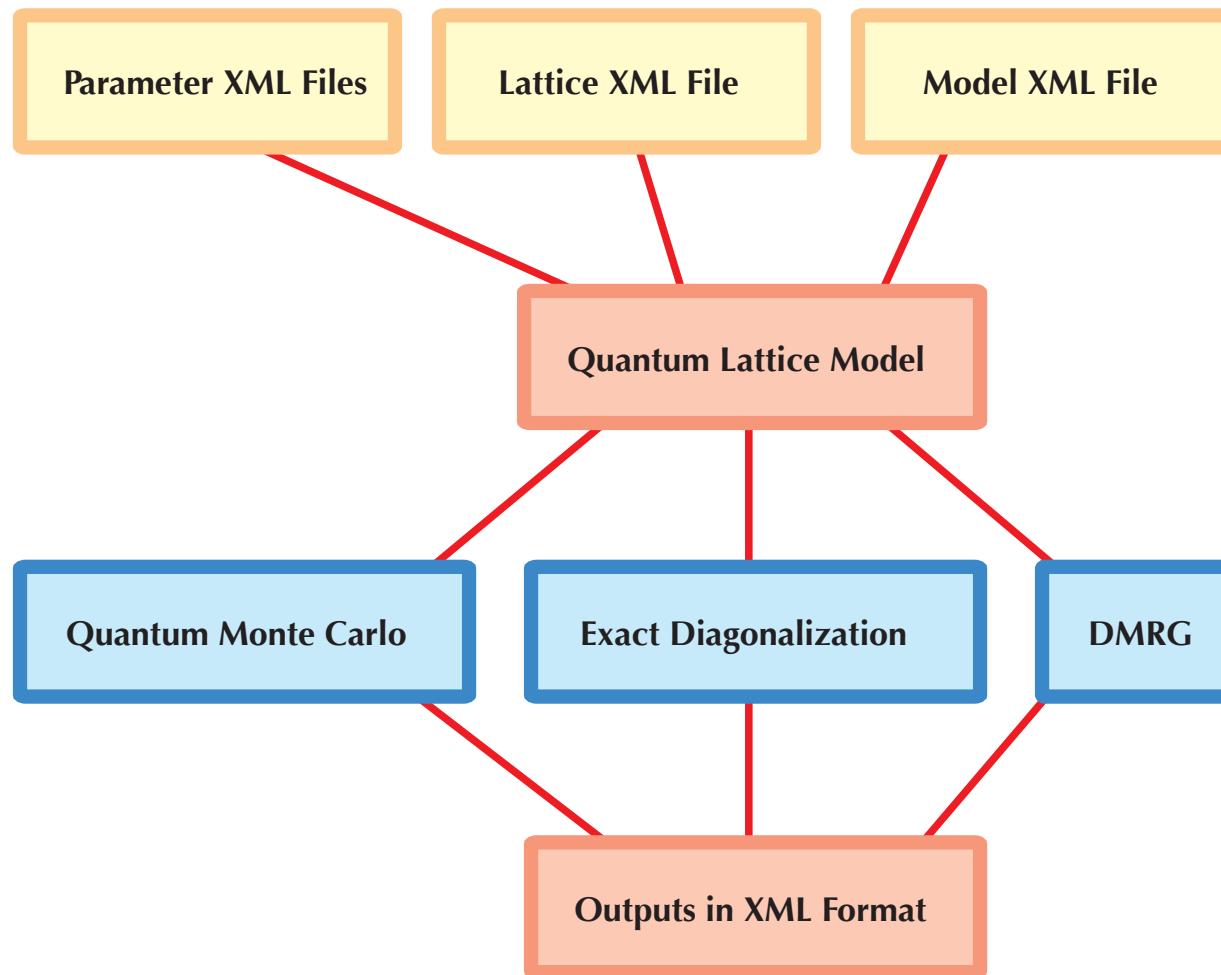
Model XML for describing Hamiltonian

XXZ spin model with two types of bonds (e.g. nearest and next nearest neighbor interactions)

```
<HAMILTONIAN name="spin">
  <PARAMETER name="Jz" default="J"/>
  <PARAMETER name="Jxy" default="J"/>
  <PARAMETER name="J" default="1"/>
  <PARAMETER name="Jz'" default="J'"/>
  <PARAMETER name="Jxy'" default="J'"/>
  <PARAMETER name="J'" default="0"/>
  <PARAMETER name="h" default="0"/>
  <BASIS ref="spin"/>
  <SITETERM site="i"> -h * Sz(i) </SITETERM>
  <BONDTERM type="0" source="i" target="j">
    Jz * Sz(i) * Sz(j) + Jxy * (Splus(x)*Sminus(y)+Sminus(x)*Splus(y)) / 2
  </BONDTERM>
  <BONDTERM type="1" source="i" target="j">
    Jz' * Sz(i) * Sz(j) + Jxy' * (Splus(x)*Sminus(y)+Sminus(x)*Splus(y)) / 2
  </BONDTERM>
</HAMILTONIAN>
```

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} [J_z S_i^z S_j^z + \frac{J_{xy}}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)] - \sum_i h S_i^z$$

Simulations with ALPS



ALPS Version 2.1

- 2012年5月
- 論文 - JSTAT P05001 (2011)
- <http://alps.comp-physics.org/>

The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems

B. Bauer¹ L. D. Carr² H.G. Evertz³ A. Feiguin⁴ J. Freire⁵
S. Fuchs⁶ L. Gamper¹ J. Gukelberger¹ E. Gull⁷ S. Guertler⁸
A. Hehn¹ R. Igarashi^{9,10} S. Isakov¹ D. Koop⁵ P.N. Ma¹
P. Mates^{1,5} H. Matsuo¹⁷ O. Parcollet¹² G. Pawłowski¹³
J.D. Picon¹⁴ L. Pollet^{11,1} T. Pruschke⁶ E. Santos⁵
V.W. Scarola¹⁵ U. Schollwöck¹⁶ C. Silva⁵ B. Surer¹ S. Todo^{17,10}
S. Trebst¹⁸ M. Troyer^{1,‡} M. L. Wall² P. Werner¹ S. Wessel^{19,20}

¹Theoretische Physik, ETH Zurich, 8093 Zurich, Switzerland

²Department of Physics, Colorado School of Mines, Golden, CO 80401, USA

³Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Graz, A-8010 Graz, Austria

⁴Department of Physics and Astronomy, University of Wyoming, Laramie, Wyoming 82071, USA

⁵Scientific Computing and Imaging Institute, University of Utah, Salt Lake City, Utah 84112, USA

⁶Institut für Theoretische Physik, Georg-August-Universität Göttingen, Göttingen, Germany

⁷Columbia University, New York, NY 10027, USA

⁸Bethe Center for Theoretical Physics, Universität Bonn, Bonn, Germany

⁹Center for Computational Science & e-Systems, Japan Atomic Energy Agency, 110-0015 Tokyo, Japan

¹⁰Core Research for Evolutional Science and Technology, Japan Science and Technology Agency, 332-0012 Kawaguchi, Japan

¹¹Physics Department, Harvard University, Cambridge 02138, Massachusetts, USA

¹²Institut de Physique Théorique, CEA/DSM/IPHT-CNRS/URA 2306, CEA-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

¹³Faculty of Physics, A. Mickiewicz University, ul. Umultowska 85, 61-614 Poznań, Poland

¹⁴Institute of Theoretical Physics, EPF Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland

¹⁵Department of Physics, Virginia Tech, Blacksburg, Virginia 24061, USA

¹⁶Arnold Sommerfeld Center for Theoretical Physics and Center for NanoScience, University of Munich, Theresienstrasse 37, 80333 Munich, Germany

¹⁷Department of Applied Physics, University of Tokyo, 113-8656 Tokyo, Japan

¹⁸Microsoft Research, Station Q, University of California, Santa Barbara, CA 93106, USA

¹⁹Institute for Solid State Theory, RWTH Aachen University, 52056 Aachen, Germany

²⁰Institut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart, Germany

<http://www.iop.org/EJ/abstract/1742-5468/2011/05/P05001>