

量子スピンの系が顕す自然

東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻 修士課程 1 年

杉本 健太朗

2017 年 1 月 15 日

1 はじめに

我々の身の回りには物質が持つ特徴で、物理的な興味を大きく引くものと言えば、それは「磁性」だろう*1。そして、物質の磁性は**古典スピン**の多体系によって精度良く近似されることも知られている。しかし、スピンの揺らぎなどの**量子効果**が支配的であるような温度領域（即ち低温）の物理や、量子効果それ自体が本質的な役割を果たす現象（例えば「量子相転移」）を理解するには、スピン系を最初から量子力学的に取り扱う必要がある。本講演の目標は、そのような取り扱いができたとして、得られる結果の一例を示す事である。本講演では、量子スピン系の例として**量子 XXZ 模型**（後述）が温度、異方性という 2 つのパラメータの元でどのような基底状態を取るかという問題 [3][4] を扱うために、統計力学の数値的な取り扱いの初歩からお話しする予定である。

2 講演内容

2.1 平衡統計力学と Monte Carlo シミュレーション

相互作用する粒子の多体系を扱い、各種の物理量の期待値を求めるのが統計力学の役割である。統計力学は、理論的な枠組みとしてはアボガドロ数オーダーの粒子の振る舞いを無限個の粒子で近似する*2。しかし、実際にそのような解析計算が困難であったり、不可能であるような場合には、有限の（アボガドロ数と比較すれば圧倒的に小さい）数の粒子がなす系を数値的に取り扱う。その代表的な方法が Markov Chain Monte Carlo (MCMC) である。物理における MCMC は、現実の系の平衡状態を仮想的な離散時間確率過程によって再現し、一定温度の環境に置かれた系の振る舞いを特徴的に取り出す優れた方法である。また、様々な粒子数の有限系の振る舞いが MCMC によって分かれば、それらを「外挿」することで無限系の振る舞いもある程度正確に分かる。

2.2 量子系と古典系間の「ある対応関係」

古典的な場合とは打って変わって、量子多体系の取り扱いに MCMC をそのまま適用することはできない。何故なら、量子系に許される時間発展の経路が適当な重みで重ね合わさることによる干渉効果を取り込むことが出来ないからである。しかし、スピン系について言えば、ある規則によって量子系を古典系に対応させることが可能となる。具体的には

$$d \text{次元量子系} \sim d + 1 \text{次元古典系}$$

*1 何に興味を引かれるかは個人差があることは言うまでもないが、それ自体の研究分野の広さと、大学学部程度の知識を以てすれば比較的理解の及び易いものとして磁性を挙げた。

*2 無限個の粒子が無限サイズの箱に入ったような系を扱うことは、単に計算を容易に実行するためだけでなく、相転移のある系が潜在的に持つ性質を数学的に明確な形で理解するためにも必要である。

という関係が存在し、それを使うと例えば「1次元量子スピン系を2次元の古典スピン系として解釈し基底状態及び各種の物理量を求める」ということが可能になる [1][2]。具体的には、ある量子系の振る舞いを調べることは、この規則に従って対応させた古典系に通常の MCMC を適用し、物理量を読み替えることと等価である。これを **Quantum Monte Carlo (QMC)** と呼ぶ。

3 補足：スピン系の MCMC 及び量子 XXZ 模型について

量子系・古典系に限らず、物理的な自由度としてスピンを実装することは可能である*3。古典系では、任意の格子次元*4を考えて、そこにスピンを並べ、それらの時間発展を次の規則に従って決める。

1. 格子上の点 (x_1, x_2, \dots, x_d) をランダムに選択する。
2. 選択した位置のスピンをランダムに「弄る」*5。
3. 弄った結果系のエネルギーが下がるならば弄り、上がってしまう場合には戻す*6。

実際には、以上の過程を何回も繰り返し、適当な時間で打ち切る*7。ところが、量子系の場合には、全系のスピンを含む状態ベクトルを何らかの方法で近似する必要があり、例え相互作用が local であっても、ある時刻の local な物理量だけから平衡状態を再現することは原理的には出来ない。しかし、QMC の対応原理によって等価な古典系を構成できる場合には、上記のような過程を繰り返して平衡状態を調べることで、実質的に量子系に MCMC を適用したことになる。また、量子系・古典系におけるスピンは、その状態分布から

離散状態 Ising 模型, Potts 模型, ...

連続状態 XY 模型, Heisenberg 模型, ...

という分類が可能である。XY 模型は、各々のスピンが2次元に束縛され、角度変数を1つもつような（規格化された2成分の）スピン系である。Heisenberg 模型は、規格化された3成分のスピン系である。これらのスピンの成分は、格子空間の次元とは全く独立であり、格子空間は1だけドスピンの成分数は3であるような場合（1次元 Heisenberg 模型）も考えられる。現実の系においても、一方向にのみ相互作用が強い導線のような物質の磁性は1次元 Heisenberg 模型によってよく近似されると考えられている。この模型は、外部磁場がなければ各々のスピンの向きが角度に偏りはない筈である。しかし、敢えて一方向にのみ各々のスピンの向き易いような場合*8を考えることも出来る*9。それを（Heisenberg 模型の一般化として）XXZ 模型と呼ぶ*10。

参考文献

- [1] 大貫義郎, 鈴木増雄, and 柏太郎. ”経路積分の方法.” (2000).
- [2] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 56, 1454 (1976).
- [3] M. Marcu and A. Wiesler, J. Phys. A: Math. Gen. 18, 2479 (1985).
- [4] M. Marcu, J. Muller, and F.-K. Schmatzer, J. Phys. A: Math. Gen. 18, 3189 (1985).

*3 スピン自体の起源が量子力学的な内部自由度であるという話とはまた別。

*4 「我々が住む次元は3次元である」というレベルの次元、或いは多数のスピンが配置される空間の次元。

*5 2状態の離散スピン系ならば単に flip し、3状態以上の離散スピン系ならば他の状態をランダムに選択する。また連続スピン系ならば角度変数をランダムに選択する。

*6 実際には弄る前からエネルギー変化を見積もり、そのような操作を accept するか reject するかを決める。古典系の場合には、無限レンジ模型であっても系のサイズが高々有限であるから、エネルギー変化を確定値として評価できる。特に最隣接にのみ相互作用がある場合には、対象となるスピン周りの local な情報のみから acceptance rate を決定できるため、計算資源の観点からも非常に経済的なアルゴリズムであることが分かる。

*7 打ち切る尺度は、系の相関時間という量によって決める。相関時間は、「時間発展の最小単位を Δt とし、物理量の時間変化のスピードが $N_T \Delta t$ である時に、相関時間は N_T である」という感じで定義する。多くの場合、系の初期状態の情報は相関時間を尺度として指数的に失われるので、十分に時間が経過した後ならば、系の状態は平衡状態に十分近いと考えられる。

*8 このことを、一軸的な異方性と呼び、異方定数という尺度によって系の Hamiltonian に情報を持たせることが出来る。

*9 もちろん、そのような物質も存在する。面内相互作用は小さいけれど面間相互作用の強い層状の擬2次元物質はその典型である。

*10 すると、Heisenberg 模型自体は XXX 模型と呼ぶことになる。