連続空間経路積分モンテカルロ法を用いた数奇量子相の探索

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻
鈴木基己

Search for novel quantum phase with continuous-space path-integral Monte Carlo

Department of Physics, Graduate School of Science, The University of Tokyo
Motoi Suzuki

Keywords:超固体,量子モンテカルロ,計算物質科学, Supersolid, Quantum Monte Carlo, Computational Materials Science

1938 年に ^{4}He が低温で超流動相へと相転移を起こすことが発見されて以来、超流動現象に対する研究が活発に行われている。特にこの 10 年では ^{4}He の 2 次元系で固体的な並進秩序と、超流動性を併せ持った量子相の存在が実験及び理論の両面から予想されており、「超固体相 supersolid」と呼ばれ各所でその探索が行われている。本講演では計算機を用いた数値計算によって超固体層の発見を目指す手法 (経路積分モンテカルロ法) を紹介する。系のハミルトニアンを $\mathcal{H}$ とすると、カノニカルアンサンブルの分配関数は

$$Z = \mathrm{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}}] = \mathrm{Tr}[(e^{-\frac{\beta}{M}\mathcal{H}})^M] = \int dx \, \langle x|(e^{-\frac{\beta}{M}\mathcal{H}})^M|x\rangle \tag{1}$$

$$= \int dx_0 dx_1 \cdots dx_{M-1} \, \langle x_0|e^{-\frac{\beta}{M}\mathcal{H}}|x_1\rangle \, \langle x_1|\cdots|x_{M-1}\rangle \, \langle x_{M-1}|e^{-\frac{\beta}{M}\mathcal{H}}|x_0\rangle \tag{2}$$

と書ける。$\mathcal{H} = \mathcal{K} + \mathcal{V}$ のようにハミルトニアンが運動項 $\mathcal{K}$ と相互作用項 $\mathcal{V}$ の和で書けるとすると、Trotter 分解によって被積分関数の各 $\langle x_{i-1}|e^{-\frac{\beta}{M}\mathcal{H}}|x_i\rangle$ が近似的に計算される。最後の式に出てくる被積分関数を重みとして $(x_0, x_1, \cdots, x_{M-1})$ をモンテカルロ法によってサンプルする方法を経路積分モンテカルロ法という。

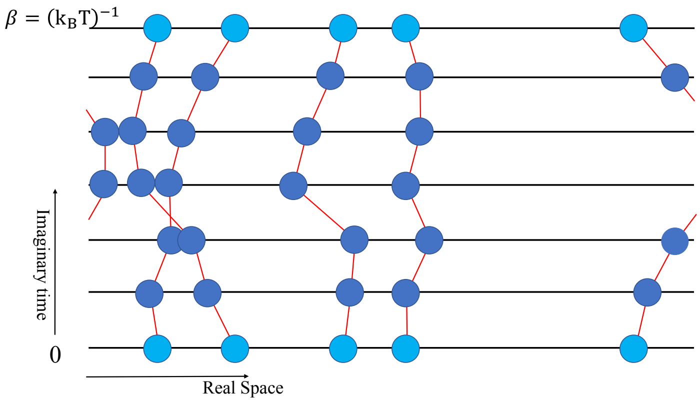

図 1: Worldline Representation (snapshot)

[1] M.Boninsegni, N.V.Prokof'ev, and B.V.Svistunov, Phys. Rev. E **74**, 036701 (2006).
[2] S.Nakamura, K.Matsui, T.Matsui, and H.Fukuyama arXiv:1406.4388v3 cond-mat.other, 2016.