

正方格子二次元 Heisenberg 模型の Monte Carlo 法による計算

2018 年 9 月 5 日

1 模型

Heisenberg 模型とは, 電子対の強磁性的/反強磁性的相互作用を簡潔に表したものである. 格子間隔の等しい $L \times L$ 個の格子点を考える. この格子を正方格子と呼ぶ. 各格子点を 1 から L^2 の自然数 i で指定することにする. 格子点ごとに電子が固定されているとしてある格子にいる電子の状態を連続的に変化する vector と見做し, spin $\mathbf{S}_i = (\cos \phi_i \sin \theta_i, \sin \phi_i \sin \theta_i, \cos \theta_i) (|\mathbf{S}_i| = 1)$ で指定する. このとき (zero 磁場) Heisenberg 模型の Hamiltonian は

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= J \sum_{\langle i,j \rangle} (\cos(\phi_i - \phi_j) \sin \theta_i \sin \theta_j + \cos \theta_i \cos \theta_j).\end{aligned}$$

ここで和は隣あう格子点の組で取ることにする.

この模型は (二次元では) 相転移しないことが知られている.

2 計算手法:(Markov 連鎖)Monte Carlo 法 (熱浴法 + 過緩和法)

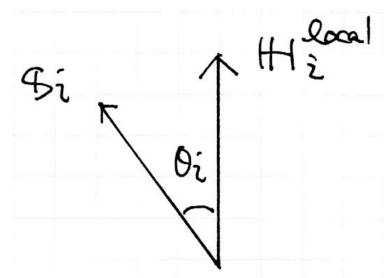
2.1 概要

(Markov 連鎖)Monte Carlo 法はある採択/棄却の取り決めにしたがって状態列を生成し系を simulate する手法である. 採択/棄却の取り決めは任意性があり, 熱浴法と過緩和法をあわせて方法が採用されることが多い.

2.2 熱浴法

Hamiltonian を

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= \frac{J}{2} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \sum_{j \in \text{NN}(i)} \mathbf{S}_j \\ &= \frac{J}{2} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{local}}\end{aligned}$$



と書き換える. ここで, $\text{NN}(i)$ は i site と隣接する site を表す. このとき canonical 分布に従って, \mathbf{S}_i と $\mathbf{H}_i^{\text{local}}$ のなす角 θ_i がある

角 θ_i^{new} より小さい確率 p_i を考える.

$$p_i = \frac{\int_0^{\theta_i^{\text{new}}} d\theta_i \sin \theta_i \exp(-\beta \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{local}})}{\int_0^\pi d\theta_i \sin \theta_i \exp(-\beta \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{local}})} \\ = \frac{\exp(\beta H_i^{\text{local}}) - \exp(-\beta H_i^{\text{local}} \cos \theta_i^{\text{new}})}{\exp(\beta H_i^{\text{local}}) - \exp(-\beta H_i^{\text{local}})}.$$

積分の計算には $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{local}} = H_i^{\text{local}} \cos \theta_i$ と書けることを利用した.

さらに spin の更新に使う表式に書き換えると

$$\cos \theta_i^{\text{new}} = -1 - \frac{1}{\beta H_i^{\text{local}}} \log \left(1 + p_i \left(e^{-2\beta H_i^{\text{local}}} - 1 \right) \right).$$

ここで p_i は $[0, 1]$ の一様乱数を振ればもともと考えていた確率と一致する.

更に $[0, 1]$ の一様乱数 r_i を振って $\phi_i^{\text{new}} = 2\pi r_i$ を決める. これで新しい spin 配位 $\mathbf{S}_i^{\text{new}} = (\cos \phi_i^{\text{new}} \sin \theta_i^{\text{new}}, \sin \phi_i^{\text{new}} \sin \theta_i^{\text{new}}, \cos \theta_i^{\text{new}})$ が決まる. しかし, この $\mathbf{S}_i^{\text{new}}$ は $\mathbf{H}_i^{\text{local}}$ を z 軸としたときの座標系での値である. 従って $\mathbf{S}_i^{\text{new}}$ を元々の座標系に戻す必要がある. $\mathbf{H}_i^{\text{local}}$ が元の座標系に対して y 軸周りに ψ , z 軸周りに φ 回転した vector だと考えると $\mathbf{H}_i^{\text{local}}$ 座標での spin $\mathbf{S}_i^{\text{new}}$ と元の座標での spin \mathbf{S}'_i は

$$\begin{pmatrix} S_i^{x\text{new}} \\ S_i^{y\text{new}} \\ S_i^{z\text{new}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \psi & 0 & \sin \psi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \psi & 0 & \cos \psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S'_i{}^x \\ S'_i{}^y \\ S'_i{}^z \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \psi & -\sin \varphi & \cos \varphi \sin \psi \\ \sin \varphi \cos \psi & \cos \varphi & \sin \varphi \sin \psi \\ -\sin \psi & 0 & \cos \psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S'_i{}^x \\ S'_i{}^y \\ S'_i{}^z \end{pmatrix}$$

の関係にある. 回転行列は直交行列なので逆行列は転置行列で \mathbf{S}'_i を求める式は

$$\begin{pmatrix} S'_i{}^x \\ S'_i{}^y \\ S'_i{}^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \psi & \sin \varphi \cos \psi & -\sin \psi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ \cos \varphi \sin \psi & \sin \varphi \sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_i^{x\text{new}} \\ S_i^{y\text{new}} \\ S_i^{z\text{new}} \end{pmatrix}$$

となる. ここで成分は

$$\cos \psi = \frac{H_i^{z\text{local}}}{H_i^{\text{local}}} \\ \cos \varphi = \frac{H_i^{x\text{local}}}{\sqrt{(H_i^{x\text{local}})^2 + (H_i^{y\text{local}})^2}} \\ \sin \varphi = \frac{H_i^{y\text{local}}}{\sqrt{(H_i^{x\text{local}})^2 + (H_i^{y\text{local}})^2}}$$

と計算できる.

熱浴法の流れをまとめると

$$\mathbf{S}_i \xrightarrow[p_i, r_i]{\text{乱数生成}} \mathbf{S}_i^{\text{new}} \xrightarrow[\psi, \varphi]{\text{座標変換}} \mathbf{S}'_i$$

となる.

この方法は p_i のための積分が解析的に求まらないと使えない. Heisenberg 模型はこの積分が解析的に求まるのでこの手法を用いる.

2.3 過緩和法

過緩和法は採用/棄却に乱数を用いず局所的な energy 変化が無いような spin update を行い必ず採用する. 具体的には

$$\mathbf{S}_i \rightarrow 2 \frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{local}}}{|\mathbf{H}_i^{\text{local}}|^2} \mathbf{H}_i^{\text{local}} - \mathbf{S}_i$$

を (乱数を用いず) 実行する. これは energy を変化させない update なので必ず採用しても問題ない.

過緩和法は相互作用が有効場の形 ($\mathbf{S} \cdot \mathbf{H}_i^{\text{local}}$) で書ける場合のみ用いることができる.

2.4 参考:Metropolis 法

熱浴法が使えない場合は Metropolis 法を用いざるを得ない. Metropolis 法では乱数を用いて single spin を変化させ, その際に生じる energy 差 ΔE を用いて, $p_i = \min\{1, e^{-\beta \Delta E}\}$ の確率でその spin 更新を採択する.

参考文献

- [1] H.Nishimori, G.Ortiz, Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena(Oxford Univ. Press, 2011) 主に実装で参考にした.
- [2] Y. Miyatake *et al.*, J.Phys.C:Solid State Phys. **19** 2539(1986) 熱浴法がわからなくなったので参照した.