

氏名	橋本昌人
生年月日	
本籍	愛知県
学位の種類	博士(理学)
学位記番号	博甲第344号
学位授与の日付	平成12年3月22日
学位授与の要件	課程博士(学位規則第4条第1項)
学位授与の題目	量子モンテカルロ・シミュレーションによるランダムボゾンハバードモデルの局在化現象の研究
論文審査委員(主査)	樋渡 保秋(理学部・教授)
論文審査委員(副査)	高須 昌子(理学部・助教授) 西川 清(理学部・教授) 田子 精男(理学部・教授) 小田 竜樹(理学部・講師)

学位論文要旨

The quenched randomness influences the critical phenomena of some physical systems. One of those phenomena is observed at the superfluid transition of ^4He absorbed in porous media. Here, the examples of porous media are xerogel, aergel porous gold and so on. Random boson Hubbard model is related to such random boson system.

In this thesis, using quantum Monte Carlo simulation and grand-canonical ensemble, the grand-state phase diagram of the random boson Hubbard model has been investigated for 1-D and 2-D systems. The phase transition, by varying chemical potential μ , between the superfluid phase and glass insulator phase, which is insulating because of the localization effects of the random media, has shown the dimensional dependence for critical chemical potential μ_c and number density ρ . As a result, it was obtained that, in the phase diagram, the area of the superfluid phase of two dimensional system becomes larger than that of one dimensional system.

The loop algorithm was applied to a soft-core boson system. Calculation efficiencies were compared between loop algorithm case and conventional quantum monte carlo algorithm case. I obtained remarkable progress of autocorrelation time for new algorithm case.

はじめに

ボーズ統計に従うヘリウム4 (^4He) では、 $T_\lambda = 2.17\text{ K}$ 以下の温度で、理想的な2次相転移である、超流動転移がおこる。ここでは、ボーズ粒子は非局在化し、長距離での(非対角)秩序状態が達成される。

一方、多孔質媒質中の ^4He では、超流動転移点が下がり、比熱のピークが広がるなど、その臨界的振舞いを汚される。これは、多孔質媒質がクエンチ系のランダム性として、臨界現象に影響を及ぼす大変興味深い現象である。

Fisher らによると、これら ^4He の有限温度での振舞いは、相互作用(ショートレンジでのクーロン反発)するボゾン系の基底状態 ($T=0$) での相転移と対応づけられる。また、その様な相互作用するボゾン系では、様々なメカニズムでボゾンの局在化現象が起こる事が

予測され、基底状態での相図自体が興味の対象となる。

本研究では、上述の様な、乱れによって臨界現象を汚される系について、量子モンテカルロ・シミュレーションを実行し、基底状態での相転移現象について考察する事を、また、1次元系と2次元系とを同一条件で計算する事により、そこでの次元依存性等について考察し、乱れによるボゾンの局在化についての定性的理解を得る事を目的とする。

また、同計算において臨界点付近等で、物理量の相関時間が増大しモンテカルロ法の計算効率の悪化する場合があった。この様な計算効率の悪化を防ぐ方法として、最近、量子スピン系等で盛んに使用されている loop アルゴリズムがある。しかしながら、ソフトコアボゾン系では、状態数が多いため、またスピン系の様な "particle-hole symmetric" が存在しないため、その効率が悪くなるとされ、現在までその適用はなされていない。ここでは、ある制限をソフトコアボゾン系に課し、その場合でについての loop アルゴリズムの開発をおこなった。

モデルと計算法

媒質の乱れを伴い、近接粒子と相互作用するボゾン系として、ランダムボゾンハバードモデルを用いた。

$$H = -\frac{t}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \sum_i (\mu + \delta_i) n_i \quad (1)$$

ここで、右辺第一項は、運動エネルギーを、第二項は、同一格子内での Coulomb 斥力項、第三項は、ケミカルポテンシャルと、媒質の乱れとしてのランダムポテンシャルである。また、 b_i^\dagger (b_i) を i 格子点での生成演算子 (消滅演算子)、 n_i を number operator とする。

本研究で用いた量子モンテカルロ法では、Suzuki-Trotter 公式により、量子系での非対角演算子を local な要素に分解し、 d 次元量子系を $d+1$ 次元古典空間に拡張して、広い意味での経路積分を実行する。

ランダムボゾンハバードモデルについて、現在までに、2次元カノニカル系、1次元グランドカノニカル系について、量子モンテカルロ法による解析が行なわれている。

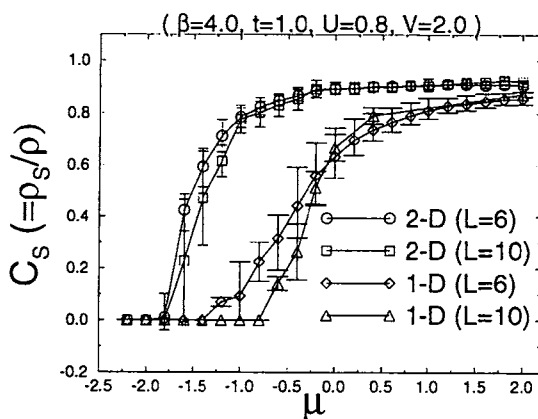


Fig.1: オーダーパラメータ C_S の結果

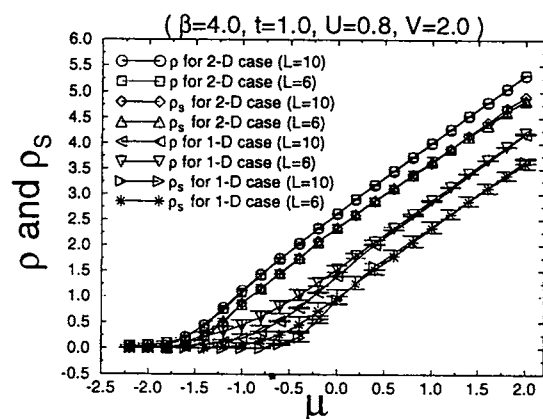


Fig.2: 各次元での ρ, ρ_S の結果

そこで本研究では、現在までその適用がなされておらず、より一般的な、2次元グランドカノニカル系について、量子モンテカルロ法によるシミュレーションを実行した。また、1次元系について、同一条件で計算を実行し、同モデルの基底状態での相転移について、次元依存性を考察した。

1次元系-2次元系の比較

Fig. 1 は、オーダーパラメーター $C_S (= \rho_S/\rho)$ のケミカルポテンシャル μ の依存性であり、また Fig. 2 は、その成分別、粒子密度 ρ , 超流動密度 ρ_S である。

ここで、超流動密度 ρ_S は、系の自由エネルギー変化より、

$$\rho_S = \frac{m}{\hbar^2} \frac{L^{2-d}}{d\beta} \langle \vec{W}^2 \rangle_{MCS} \quad (2)$$

とする。 \vec{W} (winding number) は、量子モンテカルロ法において、系の非対角長距離秩序を特徴づける観測量である。

Fig. 1 において、全ての C_S, ρ_S, ρ は、ケミカルポテンシャル μ についての増加関数となっており、1次元系、2次元系共に低密度領域において、(媒質の乱れによって、ボーズ粒子が局在化する) glass-insulator 相から超流動相への相転移を示している。 μ が大きな領域においては、オーダーパラメータ C_S は、1に収束しており、ほとんどの粒子が超流動状態にいたることが分かる。

今、相転移の起こる時の μ の値を臨界ケミカルポテンシャル μ_c とすると、 μ が μ_c より大きな時、 μ_c より上の level に粒子の存在が許され、それらの粒子は有限の winding number により、非対角長距離秩序を持ち超流動成分となる。また、 μ_c 以下の level に存在する粒子は、媒質の乱れによって局在化されているが、 μ の増加にともなって、局在化された粒子の全体に対する割合は小さくなり、 C_S は $C_S \rightarrow 1$ に収束する事となる。Fig. 1 を見てみると、2次元系の方が μ_c が小さく Fig. 2 から、ほとんど $\rho \rightarrow 0$ の近くで、転移が起こっている事が分かる。つまり、2次元系では、(このパラメーターで、) μ_c は1粒子基底状態の近くに存在し、相図中での glass insulator 相の占める割合(面積が)が1次元系に比べ小さくなり、低次元ほど局在化しやすくなっている。

反対に μ を μ_c 以下に(かつ1粒子基底状態よりは上の level に)落すと、ボゾン全て μ_c より下の level に存在することとなり、媒質に遮られる格好で非対角長距離秩序を消失する。これにより、glass-insulator 相が達成され相転移がおこる事となる。

ボゾン系での loop アルゴリズム

loop アルゴリズムとは、Ising Model などのモンテカルロ計算において、サンプリングを効果的に行うことを可能とする、ある一群のアルゴリズム(クラスタ・アルゴリズム)の一種である。量子スピン系などの計算においては、ここ数年、頻繁に使用されており、めざましい効果をあげている。ソフトコアボゾン系については、その対称性の悪さから適用が困難とされ現在の所、適用された例はない。ここでは、loop アルゴリズムに、通常モンテカルロ法を組み合わせ、かつ number operator に上限を設けその困難を解消することとした。Fig. 3 に \vec{W} と ρ のモンテカルロステップについての自己相関時間をしめす。ここで横軸 Trotter 数 M は、経路積分での虚時間方向の分割数である。(Fig. 1 と Fig. 2 の結果は、通常の局所更新によるモンテカルロ法で計算されており、loop アルゴリズムによる結果ではない。)

加重サンプリングによるモンテカルロ法では、システムに何らかの相関が存在すると、その相関より小さなスケールでの状態の遷移は達成されずらくなる。これに対して、loop アルゴリズムでは、局所的な確率過程により、状態の遷移に関するクラスターを発生させ、このクラスターごとに状態の更新を行なう。これにより、非常にエルゴディックな状態の更新

が可能となり、物理量の自己相関時間 τ は、システムサイズなどにあまり依存しなくなる。Fig. 3 で、通常のモンテカルロ法では、 $\tau \propto M^2$ となっており、計算誤差の増大を引き起こす。これに対して、loop アルゴリズムでの τ は、パラメータに依存せず、一定であり、効率良くサンプリングされていることが分かる。

まとめ

本研究では、量子モンテカルロ法により、乱れた媒質中でのボーズ粒子の局在化現象について、シミュレーションを実行し、1次元系-2次元系についての比較を行ない、これにより、基底状態での相図についての次元依存性を考察した。また、ここでは述べなかったが、glass insulator への転移には、 $|\rho - \rho_s|$ の予め局在化されている要素が重要な役割を果たすこととなる。

次にソフトコアボゾン系に対して、loop アルゴリズムの適用を行ない、その効率を調べた。今回の計算より、ソフトコアボゾン系でもクラスターアルゴリズムが有効であることが分かる。しかしながら、ここでの loop アルゴリズムは、はじめに述べたように系に、ある制限を貸している。現在より一般的な形でのボゾン系の loop アルゴリズムを開発中である。

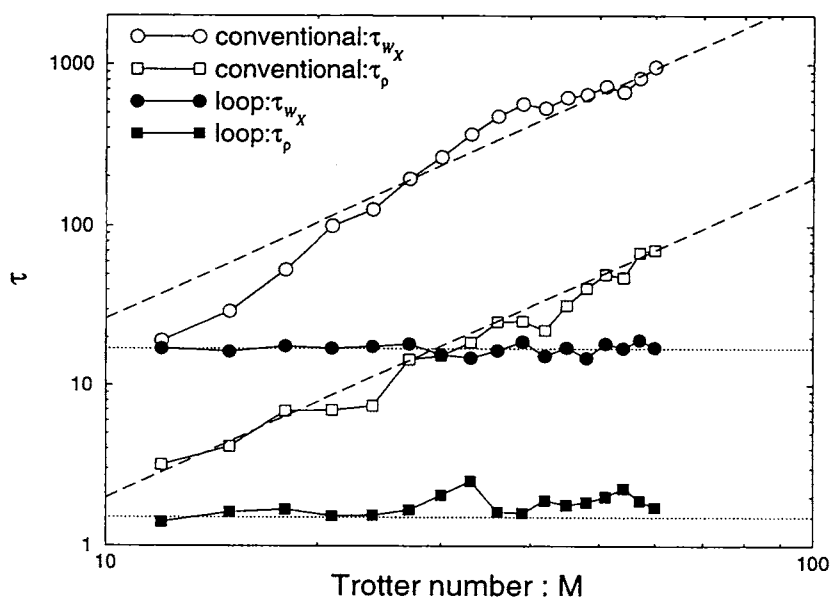


Fig.3: \vec{W} と ρ の自己相関時間。

学位論文審査結果の要旨

本論文は、量子モンテカルロ法により、ランダムボゾンハバードモデルに関する研究を行なっている。

多孔質媒質中の ^4He の超流動転移は、媒質の乱れによりその臨界的振舞いを乱される。ランダムボゾンハバードモデルは、上述の系を良く記述するものであり、臨界現象における乱れの影響を調べる意味から、大変興味深い系である。

本研究では、同モデルの基底状態の相図に注目し、また次元依存性について、量子モンテカルロ・シミュレーションにより考察を行なっている。従来行なわれていない2次元系グランドカノニカル・アンサンブルを用い、より現実的な考察を可能としている。

次元依存性についての結果から、基底状態において、低次元系ほど乱れによるボーズ粒子の局在化が、起こり易い事が定量的に示された。この結果は、スケーリングによる予測とも一致し、また2次元系-3次元系の実験事実を説明する上でも有益な結果である。

また本論文では、ソフトコアボゾン系についてのloopアルゴリズムの開発、その効率の評価も行なっている。同アルゴリズムは、臨界緩和等に影響されずモンテカルロ・サンプリングが達成されるという特徴を持つが、ソフトコアボゾン系についてはその対称性により、現在まで適用が困難であるとされてきた。

本研究では、同アルゴリズムの有益な特徴を失う事なく、ソフトコアボゾン系でのシミュレーションを可能としている。これにより今後、ソフトコアボゾン系と同様な困難を伴う他の多くの系について、同方法の適用・拡張の可能性が示された。

本研究は橋本君がほぼ独力でシミュレーションを行ない、物理的考察も中心となって進めた。なお、本研究の一部は、既に投稿論文として出版済である。

以上の審議により、本論文は、博士学位論文として価値あるものと審査委員会で判定した。