

Exchange Interaction Model の モンテカルロ・シミュレーション

小池輝雅・門脇真示*

岡山理科大学理学研究科修士課程応用数学専攻

*岡山理科大学理学部応用数学科

(1994年9月30日 受理)

1 はじめに

ここ10数年来量子スピン系のモンテカルロ法による研究が盛んに行われている。 N 個のスピンによる有限系に対する量子スピン・モンテカルロ・シミュレーションには大別して2つのアプローチがある。その1つは Suzuki により提案された d 次元の量子系を $(d+1)$ 次元の古典系に写像する方法である¹⁾。また, Homma 達は古典系のメトロポリス法を量子系に直接に拡張した Decoupled Cell 法を提案した²⁾。もう1つの方法は, ハミルトニアンが置換演算子で記述できる利点を生かし, 量子系のままで扱う方法で, Handscomb によって提案され³⁾, Lyklema により実用化された^{4,5)}。Kadowaki および Ueda は量子スピン系のための高温展開法に基づいたモンテカルロ法を提案し, スピン1/2一次元および二次元のハイゼンベルグ強磁性系に適用した⁶⁾。

本稿では, スピン S の Exchange Interaction Model (以下, EI モデルと略記する) に対して Kadowaki および Ueda による方法を適用した結果を報告する。次章では本方法における数理的な公式を述べる。第3章では展開係数のモンテカルロ評価について述べる。第4章では一次元系へ応用した結果を示し, 帯磁率 χ とその指数 γ の評価を与える。第5章で, まとめと今後の方針について述べる。

2 分配関数とその展開係数

零磁場におけるスピン S に対する EI モデルの強磁性系に対するハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{P}_{ij}, \quad (1)$$

で定義される。ただし, $J(>0)$ は結合定数であり, $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は最近接サイト対についての総和を表す。 \mathcal{P}_{ij} は $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ について $2S$ 次の多項式に展開できるシュレディンガー交換演算子である。つまり,

$$\mathcal{P}_{ij} = (-1)^{2S} \left(1 + \sum_{k=1}^{2S} \frac{(-1)^k}{(k!)^2} \prod_{l=1}^k [\cdot \mathcal{U} - l(l-1)] \right) \quad (2)$$

である。ただし、 $\mathcal{M} = 2[S(S+1) + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]$ である。 $S=1/2$ の時(1)はスピン1/2ハイゼンベルグ強磁性モデルに帰着される。このモデルは以前から H. H. Chen 達によって高温展開法⁷⁾および最近では Handscomb によるモンテカルロ法 (以後 MC 法と略記する) を適用した研究がなされてきている⁸⁾。

零磁場における、分配関数 Z は

$$Z = \text{Tr} \exp(-\mathcal{H}/k_B T) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{a_r}{r!} K^r, \quad (3)$$

の形に展開できる。ただし、 k_B は Boltzmann 定数、 T は温度を表し、 $K = J/k_B T$ である。展開係数 a_r は

$$a_r = \sum_{C_r} A(C_r), \quad (4)$$

$$A(C_r) = (2S+1)^{k(C_r)} \quad (5)$$

で与えられる。ただし、 C_r は r 個の交換演算子 \mathcal{P}_{ij} の積 $\mathcal{P}(C_r)$ による列である。置換の性質により、演算子 $\mathcal{P}(C_r)$ は $k(C_r)$ 個の独立したサイクルに分解できる。このとき v_l を長さ l の独立したサイクルの個数とすると、 $k(C_r) = \sum_{l=1}^N v_l$ で与えられる。 v_l ($l=1, \dots, N$) は次式を満足しなければならない。

$$1v_1 + 2v_2 + \dots + lv_l + \dots + Nv_N = N. \quad (6)$$

ただし N は系のスピンサイトの数である。

次に、零磁場における帯磁率 χ_0 は

$$\frac{k_B T \chi_0}{N \mu^2} = \frac{1}{N} \frac{1}{Z} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{d_r}{r!} K^r \quad (7)$$

のように展開できる。ただし、 μ は磁気モーメントである。展開係数は

$$d_r = \sum_{C_r} D(C_r), \quad (8)$$

$$D(C_r) = \frac{4}{3} S(S+1) (2S+1)^{k(C_r)} \sum_{l=1}^N v_l l^2 \quad (9)$$

で与えられる。(8), (9)式を(7)式に代入すれば

$$\frac{k_B T \chi_0}{N \mu^2} = \frac{4S(S+1)}{3NZ} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{C_r} \left(\sum_{l=1}^N v_l l^2 \right) \frac{K^r}{r!} (2S+1)^{k(C_r)} \quad (10)$$

を得る。

3 展開係数のモンテカルロ評価

3.1 展開係数のためのモンテカルロ・サンプリング

零場における帯磁率は(7)式による級数展開で理論的には厳密に評価できる。しかしなが

ら、列 C_r は r が大きくなるにつれて急速にその数を増すので厳密なトレース値 d_r を評価することが不可能になってくる。なぜならば、与えられた格子系における最近接サイト対の数を N_b とすると、列 C_r は集合 $\{1, 2, \dots, N_b\}$ から r 個を復元抽出してえられた交換演算子の積 $\mathcal{P}(C_r)$ で与えられ、全部で N_b^r 個存在するからである。そこで、(8)式の右辺における $D(C_r)$ の C_r についての総和を単純なサンプリングによる MC 法を用いて d_r を \bar{d}_r で近似的に評価することにする。つまり、

$$\bar{d}_r = N_b^r \bar{D}_r, \quad (11)$$

$$\bar{D}_r = \sum_{MC} D(C_r) / N_s \quad (12)$$

である。ただし、 \sum_{MC} は N_s 個のモンテカルロサンプリングについての和を表す。これらの値を得るためには、まず無作為に復元抽出によって C_r に関する互換の積 $\mathcal{P}(C_r)$ を N_s 個生成する。各 $\mathcal{P}(C_r)$ を独立したサイクルに分解し、各 C_r について、それぞれ $k(C_r)$ および $\sum_{i=1}^N \nu_i l^2$ を求め(9)式により $D(C_r)$ を評価し、 N_s 個の和をとり、平均すればよい。

3.2 パデ近似による内挿法

さて、前章で示した分配関数級数および帯磁率級数の展開係数を評価すればよいが、低温領域の熱力学的諸量を評価するには、本モデルの系においては数万から数十万項の展開係数を評価することが要求される。更にシステムサイズ N が大きくなると数項の係数を評価することでさえ大変な計算時間を必要とする。これらの計算時間を節約し、より大きい N について評価が行なえるように、以下のような一種のパデ型有理多項式近似による内挿公式を導入する。

$$y_r = \frac{\beta_0 + \beta_1 x_r + \beta_2 x_r^2 + \dots + \beta_m x_r^m}{\alpha_0 + \alpha_1 x_r + \alpha_2 x_r^2 + \dots + \alpha_n x_r^n}, \quad (13)$$

ただし、 $\alpha_0 = 1$ および $m + n + 1 = M$ である。 $M - 1$ 個の未定係数 α_1, \dots, β_m は次の斉一次方程式を数値的に解くことにより決定される。

$$\sum_{i=0}^m \beta_i x_{r_k}^i - y_{r_k} \sum_{i=0}^n \alpha_i x_{r_k}^i = 0, \quad k = 1, 2, \dots, M \quad (14)$$

この方法により、僅か10個程度の係数により幾10万もの内挿された展開係数を得ることができる。パデ近似における分子の多項式の次数 m と分母の多項式の次数 n の選び方に対する法則を与えることは困難ではあるが、一般的に $m = n$ あるいは $m = n + 1$ がよいとされている。パデ近似では、区間の端に近づくにつれて誤差が大きくなるという性質もあり、この m および n のとり方は比較的小さい区間を念頭においたものである⁹⁾。本モデルに対しては経験上、内挿点の個数 $m + n$ を7から9ぐらいにとり、 m および n を上記のとおりを選ぶといいようである。

3.3 内挿点に関する区間推定

さてここで、(13)式を用いて帯磁率級数の展開係数を内挿する手順を述べよう。

まず、(12)式により評価された q 個の相異なる展開係数の MC 値 \bar{D}_r を、それぞれ \bar{D}_{r_1} , \bar{D}_{r_2} , \dots , $\bar{D}_{r_{q-1}}$, \bar{D}_{r_q} とする。ただし、 r_i ($r_1 \equiv 1 < r_2 < \dots < r_q \equiv r_{max}$) は展開項の次数に対応している。この添字の集合 $\{r_2, \dots, r_{q-1}\}$ から非復元抽出により $M-3$ 個を取り出したものに r_1 および r_{max} を加えた合計 $M-1$ ($\leq q$) 個の内挿点を 1 組とし、その第 i 組を ϕ_i で表すことにする。これらは全部で ${}_{q-2}C_{M-3} \equiv n$ 組存在する。つまり、

$$\phi_i : \{\bar{D}_{r_1}, \overbrace{\bar{D}_{r_2}, \dots, \bar{D}_{r_{q-1}}}^{\text{非復元抽出により } M-3 \text{ 個選択}}, \bar{D}_{r_q}\} \quad (i:1, \dots, n).$$

尚、組 ϕ_i に対して(14)式の未定係数を定めるとき、それぞれ $x_{r_k} = r_k$ および $y_{r_k} = \bar{D}_{r_k}$ にとる。

次に各 ϕ_i についての(13)式による第 j 展開係数内挿値を $z_j^{(i)}$ で表すことにすると、

$$\begin{aligned} & \{z_1^{(1)} \dots z_j^{(1)} \dots z_r^{(1)}\} \\ & \{z_1^{(2)} \dots z_j^{(2)} \dots z_r^{(2)}\} \\ & \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\ & \{z_1^{(n)} \dots z_j^{(n)} \dots z_r^{(n)}\} \end{aligned}$$

を得る。これらの各組の第 j 列についての平均値 z_j は

$$z_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z_j^{(i)} \quad (j:1, \dots, r)$$

で与えられる。しかしながら、組 ϕ_i によっては内挿がうまくいかない場合もあり、それらは除外し、この n 全てについての平均はとらずに、内挿がうまくいったものだけの平均をとる。それを改めて z_j と表すことにする。

本方法では、内挿時において固有の系統誤差および偶然誤差が入ってくるので、その対策として、各 z_j 毎に区間推定法による採択域 ($z_j - \epsilon$, $z_j + \epsilon$) を定め、その領域内に入る値だけを採用する必要がある。しかしながら、一般的な区間推定法にしたがって ϵ を求めても、今の場合は次の理由から内挿が適用できない。つまり、表 1 に示した $S = 1/2$, $N = 64$ のときの展開係数の MC 値 \bar{D}_{r_i} から分かったとおり、 $r \leq 35$ および $r \geq 640$ では 2 桁の有効精度を有しているとみなされるが、 r が N に近いあたりでは一桁弱の有効精度に落ちてくる。これは、各サンプルにおける演算子 $\mathcal{P}(C_r)$ をサイクル分解したとき、サイクルの長さ l が前者では短いものか長いものに偏っているので比較的精度よくトレース値を評価できるが、後者では長いものと短いものとがさまざまに入り交じっているため、統計誤差が大きなトレース値しか得られないためである。その結果、内挿区間の両端では採

択域が狭くなり、 r が N に近いところは採択域が広がる。以上のことから、各展開係数内挿値において平均値から $\pm 10\%$ を許容範囲として $\varepsilon = 0.1\bar{D}_r$ にとり、その採択域に属する内挿値に対して新たに平均をとることにした。この取り方は粗そうであるが、次章の応用例からも明らかなように強磁性体系においては、熱力学的諸量の値は展開係数の値の精度にあまり敏感ではないので有効である。これに反し、反強磁性体系では、展開係数の値の精度に非常に敏感であるので問題を困難なものにしている。

4 一次元系への応用

前章の内挿法により、 $S = 1/2$ に対して $N = 32, 64$ および 128 , $S = 1$ に対して $N = 32$ および 64 , また $S = 3/2$ に対して $N = 32$ における一次元強磁性 EI モデル系の展開係数を評価し、(7)式により帯磁率 $k_B T\chi_0/N\mu^2$ を求めた結果をそれぞれ表 2, 3 および 4 に示す。これらの表における誤差範囲は、3 回から 5 回の独立したシミュレーションを行なって、おのおのの帯磁率を平均したときの平均値 \pm 標準誤差を表す。計算時間の問題がなければ、10 回程度は独立試行を行ないたいところである。

さて、Takahashi による修正スピン波理論を用いたスピン S の一次元ハイゼンベルグ強磁性系での帯磁率は

$$\chi = AJ(k_B T)^{-2} [1 + B(k_B T/J)^{\frac{1}{2}} + C(k_B T/J) + \dots], \quad (15)$$

$$\text{ただし, } A = 2.66666667S^4, \quad B = 1.23587583S^{-\frac{3}{2}}, \quad C = 0.50912969S^{-3} \quad (16)$$

で与えられる¹⁰⁾。われわれの結果との対比のため、その数値結果を表 2 の右端の欄に示す。この表からわれわれの結果は N を大きくとり、高次の展開項まで取り込むと低温になるほど Takahashi の結果とよく一致することがわかる。

表 1 内挿に用いた $S=1/2$, $N=64$ の展開係数の MC 値

i	r_i	(サンプル数)	\bar{D}_r
1	1	(exact)	$0.608743 \cdot 10^{21}$
2	5	($3 \cdot 10^7$)	$0.621766 \cdot 10^{20} \pm 0.494497 \cdot 10^{17}$
3	10	($3 \cdot 10^7$)	$0.631097 \cdot 10^{19} \pm 0.108127 \cdot 10^{17}$
4	20	($3 \cdot 10^7$)	$0.201948 \cdot 10^{18} \pm 0.780149 \cdot 10^{15}$
5	35	($3 \cdot 10^7$)	$0.581692 \cdot 10^{16} \pm 0.403412 \cdot 10^{14}$
6	50	($3 \cdot 10^7$)	$0.490066 \cdot 10^{15} \pm 0.567352 \cdot 10^{13}$
7	128	($3 \cdot 10^7$)	$0.713543 \cdot 10^{12} \pm 0.191744 \cdot 10^{11}$
8	320	($3 \cdot 10^7$)	$0.263046 \cdot 10^{10} \pm 0.506980 \cdot 10^8$
9	640	($3 \cdot 10^7$)	$0.884922 \cdot 10^8 \pm 0.131636 \cdot 10^7$
10	960	($3 \cdot 10^7$)	$0.177342 \cdot 10^8 \pm 0.170597 \cdot 10^6$
11	1280	($3 \cdot 10^7$)	$0.664350 \cdot 10^7 \pm 0.695229 \cdot 10^5$
12	3200	($3 \cdot 10^7$)	$0.650683 \cdot 10^6 \pm 0.424384 \cdot 10^4$
13	6400	($3 \cdot 10^7$)	$0.223768 \cdot 10^6 \pm 0.637456 \cdot 10^3$

表2 $S=1/2$, $N=32, 64$ および 128 における帯磁率 $k_B T\chi_0/N\mu^2$

$k_B T/J$	$N=32$	$N=64$	$N=128$	Takahashi
1.00	1.4745 ± 0.0003	1.4751 ± 0.0008	1.4760 ± 0.0010	1.4281
0.90	1.5226 ± 0.0003	1.5259 ± 0.0011	1.5222 ± 0.0013	1.4781
0.80	1.5809 ± 0.0003	1.5876 ± 0.0016	1.5782 ± 0.0016	1.5385
0.70	1.6531 ± 0.0003	1.6635 ± 0.0023	1.6474 ± 0.0018	1.6133
0.60	1.7451 ± 0.0003	1.7593 ± 0.0033	1.7364 ± 0.0018	1.7087
0.50	1.8674 ± 0.0003	1.8844 ± 0.0045	1.8568 ± 0.0017	1.8361
0.40	2.0408 ± 0.0003	2.0570 ± 0.0059	2.0318 ± 0.0016	2.0167
0.30	2.3144 ± 0.0005	2.3189 ± 0.0074	2.3134 ± 0.0021	2.2981
0.20	2.8336 ± 0.0011	2.7977 ± 0.0082	2.8449 ± 0.0024	2.8149
0.10	4.2667 ± 0.0033	4.1452 ± 0.0093	4.2334 ± 0.0073	4.1878
0.09	4.5590 ± 0.0038	4.4376 ± 0.0097	4.5130 ± 0.0099	4.4727
0.08	4.9098 ± 0.0043	4.7993 ± 0.0101	4.8533 ± 0.0130	4.8220
0.07	5.3366 ± 0.0049	5.2574 ± 0.0103	5.2796 ± 0.0165	5.2618
0.06	5.8639 ± 0.0057	5.8540 ± 0.0099	5.8342 ± 0.0199	5.8351
0.05	6.5254 ± 0.0066	6.6587 ± 0.0081	6.5950 ± 0.0224	6.6176
0.04	7.3662 ± 0.0076	7.7945 ± 0.0038	7.7192 ± 0.0217	7.7585
0.03	8.4382 ± 0.0084	9.5015 ± 0.0058	9.5731 ± 0.0128	9.5980
0.02	9.7502 ± 0.0073	12.3247 ± 0.0235	13.1969 ± 0.0259	13.1318

表3 $S=1$, $N=32, 64$ における帯磁率 $k_B T\chi_0/N\mu^2$

$k_B T/J$	$N=32$	$N=64$
1.00	3.5040 ± 0.0071	3.5583 ± 0.0291
0.90	3.5941 ± 0.0058	3.6581 ± 0.0409
0.80	3.7036 ± 0.0040	3.7780 ± 0.0564
0.70	3.8385 ± 0.0035	3.9235 ± 0.0762
0.60	4.0080 ± 0.0070	4.1030 ± 0.1003
0.50	4.2270 ± 0.0128	4.3304 ± 0.1269
0.40	4.5248 ± 0.0193	4.6324 ± 0.1503
0.30	4.9699 ± 0.0236	5.0706 ± 0.1564
0.20	5.7750 ± 0.0200	5.8318 ± 0.1165
0.10	8.0193 ± 0.0541	7.8943 ± 0.1337
0.09	8.4990 ± 0.0646	8.3450 ± 0.1599
0.08	9.0870 ± 0.0763	8.9077 ± 0.1888
0.07	9.8213 ± 0.0888	9.6294 ± 0.2181
0.06	10.7580 ± 0.1011	10.5850 ± 0.2427
0.05	11.9810 ± 0.1109	11.9018 ± 0.2517
0.04	13.6163 ± 0.1134	13.8114 ± 0.2229
0.03	15.8439 ± 0.0985	16.7834 ± 0.1250
0.02	18.8420 ± 0.0517	21.9328 ± 0.1750

表4 $S=3/2$, $N=32$ における帯磁率
 $k_B T \chi_0 / N \mu^2$

$k_B T / J$	$N=32$	
1.00	6.1777	± 0.0016
0.90	6.2926	± 0.0019
0.80	6.4314	± 0.0025
0.70	6.6024	± 0.0035
0.60	6.8201	± 0.0047
0.50	7.1108	± 0.0047
0.40	7.5282	± 0.0025
0.30	8.1941	± 0.0298
0.20	9.4273	± 0.1066
0.10	12.1953	± 0.0490
0.09	12.6606	± 0.1605
0.08	13.2050	± 0.3201
0.07	13.8780	± 0.5271
0.06	14.7838	± 0.7684
0.05	16.1425	± 1.0102
0.04	18.3977	± 1.1958
0.03	22.2817	± 1.0944
0.02	28.0043	± 0.2269

ここで, Chen 達のアプローチ⁸⁾に従って, 一次元 EI モデルの帯磁率においても上式が成り立つ (ただし, 定数 A は S^4 に比例し, 定数 B は $S^{3/2}$ に逆比例し, C は S^3 に逆比例する) ものと仮定して, (15)式の第2項までを取り入れ $\chi k_B^2 T^2 / J$ を $(k_B T / J)^{1/2}$ について直線のあてはめと, 第3項までを取り入れた2次曲線のあてはめとを行なった。われわれの帯磁率の表示 $k_B T \chi_0 / N \mu^2$ は(15)式では $k_B T \chi$ に対応している。あてはめに際し, $S=1/2$ の場合は図1に示した12個のデータを, $S=1$ の場合には最右端と最左端にプロットされたものを除いた10個のデータを用いて行なった。その結果, 2次曲線のあてはめが Takahashi の結果とよく適合することが分かった。それらのあてはめの係数は次のとおりである。つまり, (15)式の係数の組 (A, AB, AC) は $S=1/2$ の $N=64$ および 128 に対して, それぞれ, $(A, AB, AC) = (0.1982 \pm$

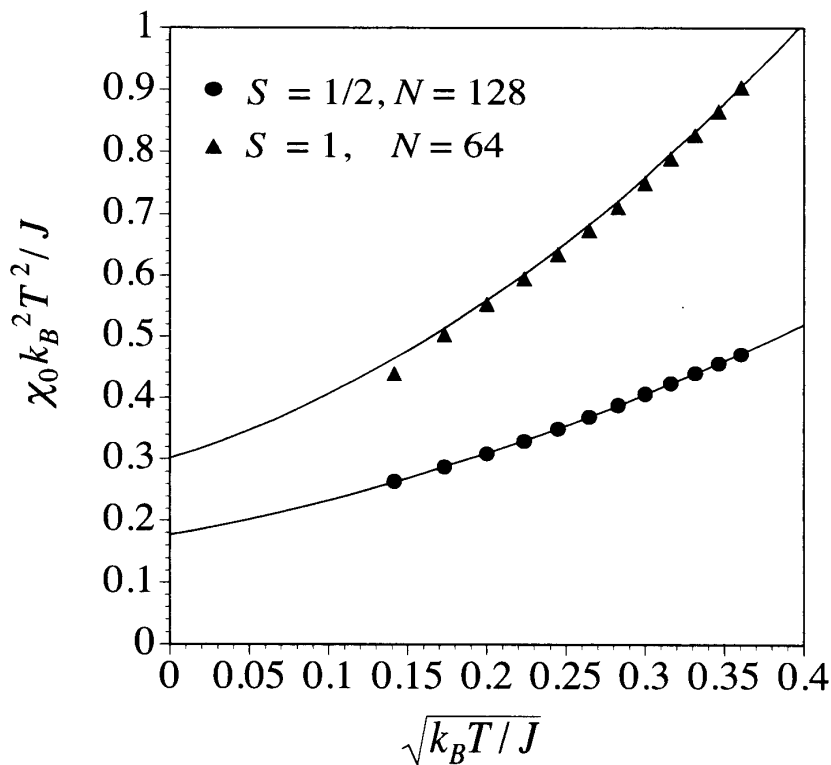


図1 $S=1/2, 1$ の $N=128, 64$ に対する $\chi_0 k_B^2 T^2 / J$ の温度依存性
ただし, 実線は2次曲線としてのガイドラインである

0.0044, 0.4111 ± 0.0344 , 0.8656 ± 0.0602), (0.1763 ± 0.0063 , 0.4772 ± 0.0569 , 0.9535 ± 0.1090) であり, $S=1$ の $N=64$ に対して, $(A, AB, AC) = (0.3011 \pm 0.0017, 0.8096 \pm 0.0302, 2.400 \pm 0.0306)$ である。また, $S=3/2$ の $N=32$ に対してはスピンサイズが大きいことと, システムサイズが小さいことのため低温での振る舞いを評価できるまでには至らなかった。いずれの場合も $(k_B T/J)^{1/2} > 0.15$ の温度領域ではまだ $(k_B T/J)^{1/2}$ について高次項の寄与が無視できないためであり, 計算時間の問題はありますが, もっとシステムサイズを大きくし, より低温の領域であれば直線のあてはめでもよいことが予想できる。

さて, $T \rightarrow 0$ に対して帯磁率が $\chi \propto T^{-\gamma}$ の形で発散するとき, γ を温度 T の関数とみなせば,

$$\gamma(T) = -(T/\chi)(\partial\chi/\partial T) = -\partial \ln \chi / \partial \ln T \quad (17)$$

で与えられる。したがって, $\ln \chi$ 対 $\ln T$ のプロットをとれば, その傾きとして $-\gamma$ を得ることができる。数値計算では, $\gamma(T)$ は2つの互いに近い温度 T_1 および T_2 に対して

$$\gamma(T) = \gamma\left(\frac{1}{2}(T_1 + T_2)\right) = -\frac{\ln \chi(T_1) - \ln \chi(T_2)}{\ln T_1 - \ln T_2} \quad (18)$$

で評価できる。

(18)式により得られた $\gamma(T)$ のプロットを図2に示す。この図にプロットされたデータの中の直線部分を取り出して直線のあてはめを行なった結果, $S=1/2$ の $N=64, 128$ および $S=1$ の $N=64$ に対して, それぞれ $\gamma(T \rightarrow 0) = 1.99 \pm 0.01$, 2.00 ± 0.02 および $\gamma(T \rightarrow 0) = 1.94 \pm 0.01$ を得た。

ところで, (15)および(17)式より

$$\gamma(T) = -\frac{T}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial T} = 2 - 0.5B(kT/J)^{1/2} + \dots \quad (19)$$

となり, $\gamma(0) = 2$ を得る。上記の結果は, いずれもこの事実によく適合している。したがって, われわれの結果も Chen 達の推測⁹⁾を支持するものである。

5 ま と め

近年のコンピュータの性能の向上に伴い, 従来1セットしか採取できなかったデータ⁶⁾が3セットから5セットを独立に採取することも可能となってきた。われわれは, 本研究において実験結果の信頼性を向上するために, 3.3節で紹介した区間推定法を新たに導入した。これにより, 熱力学的諸量を従来より⁶⁾数値的に安定して評価できるようになった。

われわれのスピン $S=1/2$ 一次元ハイゼンベルグ強磁性系での帯磁率の MC 値は, 表2のとおり $0.02 \leq k_B T/J \leq 0.5$ の温度領域では Takahashi の結果とよく一致している。Takahashi の結果はスピン波理論にもとづいているので低温において信頼性が高い。われわれの結果は高温からかなり低温までの幅広い温度範囲にわたって合理的な結果を得るこ

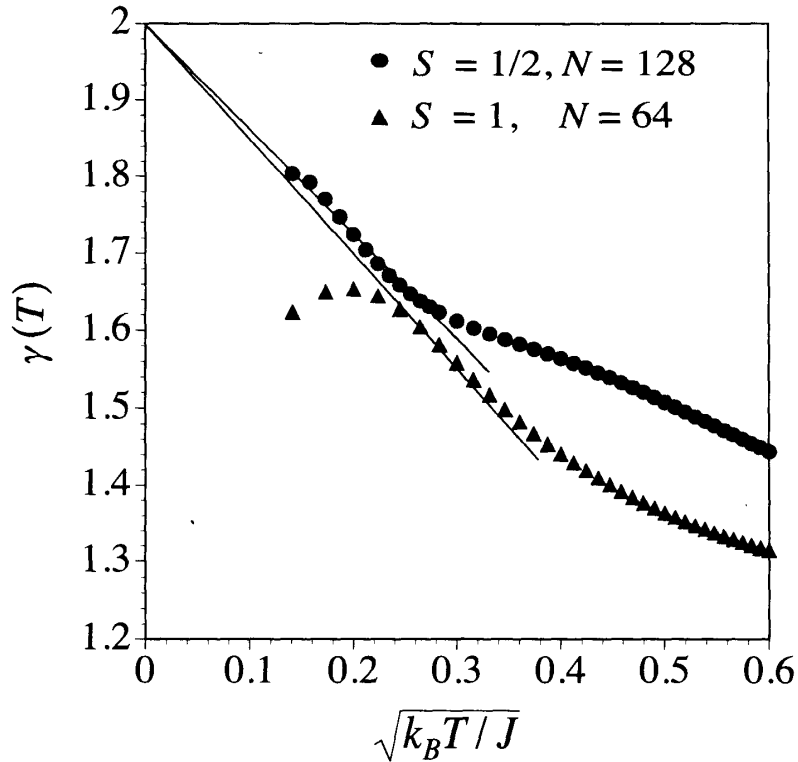


図2 $S=1/2, 1$ の $N=128, 64$ に対する関数 $\gamma(T)$ の温度依存性
ただし、実線は $\gamma(T \rightarrow 0) = 2$ に対するガイドラインである

とができる⁶⁾。EI モデルでも、 $(k_B T/J)^{1/2}$ の関数として(15)式によく適合していることが本数値実験の結果から明らかになった。また、 $T \rightarrow 0$ に対する帯磁率指数 $\gamma(T)$ が、Chen 達の推測⁸⁾と同じく 2 に収束するという結果を得た。

本方法が EI モデルにも有効であることがわかったが、さらに大きなスピンサイズ S およびシステムサイズ N に適用するには、3章で述べた展開係数の MC 値を得るときのモンテカルロ・サンプリングの方法を改良していくことが不可欠であるし、他のモデルに適用するためには置換の性質を利用しない形に改良しなければならない。

謝 辞

著者門脇は、本方法を共同で開発し、いつも懇切にご教示いただいている福井県立大学上田顯教授に深謝いたします。

参考文献

- 1) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454 ; **58** (1977) 1377.
- 2) S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita, M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **72** (1984) 1245 ; **75** (1986) 1058.
- 3) D. C. Handscomb, Proc. Camb. Phil. Soc. **58** (1962) 594 ; **60** (1964) 115.

- 4) J. W. Lyklema, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 88.
- 5) J. W. Lyklema, Phys. Rev. B **27** (1983) 3108.
- 6) S. Kadawaki and A. Ueda, Prog. Theor. Phys. **75** (1985) 451 ; **78** (1987) 224.
- 7) H. H. Chen and R. K. Joseph, J. Math. Phys. **13** (1972) 725.
- 8) Y. C. Chen, H. H. Chen and F. Lee, Phys. Lett. A **130** (1988) 257.
- 9) A. Ralston and P. Rabinowitz, *A FIRST COURSE IN NUMERICAL ANALYSIS 2nd Edition*. McGrawHill, Inc. (1978).
A. ラルストン, P. ラビノヴィッツ (戸田英雄, 小野令美訳), 電子計算機のための数値解析の理論と応用 (下). ブレイン団書出版, 丸善. (1986).
- 10) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. Suppl. **87** (1986) 223.

Quantum Monte Carlo Simulation of the one-dimensional Exchange Interaction Model

Terumasa KOIKE and Shinji KADOWAKI*

*Department of Applied Mathematics, the Graduate School of Science,
Okayama University of Science,*

**Department of Applied Mathematics, Faculty of Science,
Okayama University of Science,*

1-1 Ridai-cho, Okayama 700, Japan

(Received September 30, 1994)

A simple Monte Carlo method by Kadowaki and Ueda is applied to calculate the zero-field susceptibility of the one-dimensional spin- S exchange interaction model. Our numerical results for the one-dimensional spin- $1/2$ Heisenberg system are in good agreement with Takahashi's. For the spin- S exchange interaction model, we predicate that the exponent of the susceptibility as function of temperature, $\gamma(T)$ is 2 as $T \rightarrow 0$. Therefore we support in the conjecture by Chen et al., $\gamma(0) = 2$.