

# 量子数射影変分法と2次元ハバード模型

水崎 高浩

客員研究員、Univ. Paris 11、IPN (CNRS)  
and Univ. Senshu

## 概要

量子数射影した波動関数による変分法を2次元のハバード模型に適用した。運動量射影やスピン射影をうまく組み合わせることで、効率よくエネルギーの低い状態が見つかることを示す。

## 1 はじめに

強く相互作用する量子多粒子系では、平均場近似を越えた方法が本質的になる。その一つの方法として、原子核構造の理論では、量子数射影を行った波動関数による変分法が広く利用されてきた [1]。この方法は、量子多体系の一般的な性質を利用したもので、他の分野にも応用しようと考えられる [2, 3]。本稿では、この量子数射影を行った波動関数による変分法を物性理論で重要な模型であるハバード模型に適用することを考察する。特に2次元正方格子の場合を考え、対称性としては、全スピンと並進対称性を取り上げる。

### 1.1 格子上の電子の問題

ハバード模型は、格子上で相互作用する電子を扱う模型である。格子の形状にはいろいろありうるが、ここでは、図1のような正方格子を考える。図には、格子サイズ  $4 \times 4$ ,  $6 \times 6$ ,  $8 \times 8$ ,  $10 \times 10$  の場合を示したが、考察すべきは格子サイズを  $\infty$  にした熱力学的極限である。

この格子の各格子点には、スピン自由度を持つ電子が入る。このとき、パウリ原理により同じ方向のスピンをもつ電子は2つ入ることはできないが、スピンの向きが異なれば、各

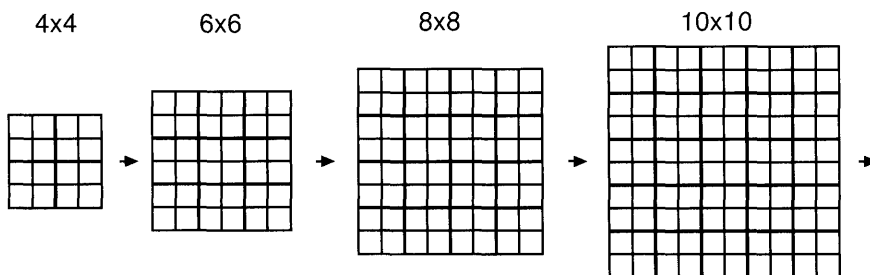


図 1: 正方格子 (格子サイズ  $4 \times 4$ ,  $6 \times 6$ ,  $8 \times 8$ ,  $10 \times 10$  の場合)

格子点には電子は最大2つまで入ることはできる。従って、格子のサイズを決めると、その2倍の数の電子までその格子に収容できる。本稿では、格子点と同じ数、つまり、電子の充填率が0.5（ハーフ・フィールド）の場合を考える。

格子のサイズと充填率を決めると、状態数を求めることができる。例えば、 $4 \times 4$ の格子では、ハーフ・フィールドの場合、16個の電子を考えることになる。トータルスピンの0である状態は、アップおよびダウンスピンの数がそれぞれ8個ずつになる。8個のアップスピン、8個のダウンスピンが双方独立に16個の格子点のどこかにいるというのは、組み合わせの数で計算でき、その全状態数は  $({}_{16}C_8)^2 = 165636900$  になる。

スピンや運動量に関する対称性を考えなければ、この次元のハミルトニアン行列を対角化することで量子状態を求めることができる。昨今のコンピュータを使えば、このような小さな格子の問題は行列の対角化によって容易に解ける。しかしながら、議論すべきは格子サイズを $\infty$ にした熱力学的極限であり、可能な限り巨大な格子の問題を解き、物理量を格子サイズ $\infty$ に外挿しなければならない。

一般に格子サイズを  $N \times N$  とすれば、ハーフ・フィールドの場合、状態数は  $(N^2 C_{\frac{1}{2}N^2})^2$  となり、格子サイズ  $N$  に対して極めて急速に増大するため、 $6 \times 6$  以上の格子の問題はもっとも直接的な解法である対角化では全く解くことはできないし、今後のコンピュータの急速な発展を考慮しても解けるようにはならない。このような問題を解くには、量子多体問題の理論的な扱いを発展させることが不可欠である。

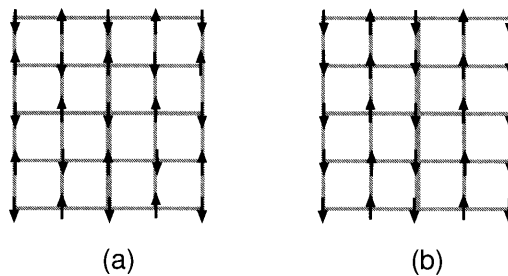


図 2: (a) アンチフェロの配位、(b) ストライプの配位

## 1.2 電子相関とハバード模型

格子上的電子には2つの重要な相関がある。1つは、クーロン力という斥力による相関である。クーロン力が電子間に働くため、電子同士は可能なかぎり遠ざかろうとする。ハーフ・フィールドの場合では、電子相関としてクーロン力のみを考えると、一つの格子点に2つの電子がいる（二重占有という）状態はエネルギー的に不利となる。その結果、各格子点に電子が一個入った状態が有利になるため、電子の移動の自由度は消失し、スピン自由度だけが残り、各格子点に束縛された電子スピンは、図 2(a) のようになる。これは、反

磁性（アンチフェロ）相と呼ばれる。

もう一つの重要な相関は、電子を隣接格子点に移動させるホッピングの相互作用である。この相互作用によって電子は格子点間を移動し、この相互作用の強さ（普通  $t$  であらわされる）が大きくなると金属相になる。

この二つの強さ  $U$  と  $t$  が競合する領域では、系の基底状態はハバード模型を厳密に解く必要がある。図 3(a) のようにホッピング項が最近接格子間しかないハバード模型の場合は、量子モンテカルロ法 [5] によって基底状態を求めることができ、この 2 つの電子相関の競合についてはすでに明らかにされている。

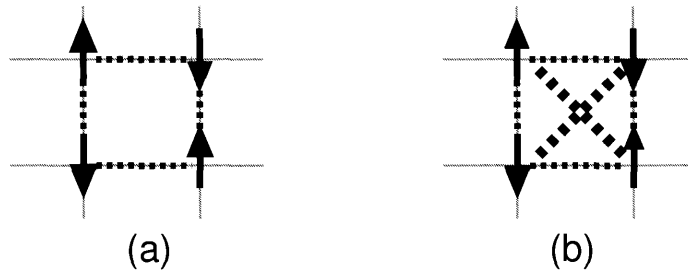


図 3: (a) 最近接相互作用 (b) 最近接+次最近接相互作用

### 1.3 フラストレーション

次に、図 3(b) に示すような次最近接格子点間のホッピング相互作用を考えてみよう。最近接に加え次最近接相互作用がある場合、フラストレーションという現象がおきることが知られている。それを、三角格子を例に説明したのが図 4 である。

まず、2 つの電子スピンは、逆向き（シングレット）になるとエネルギーが下がることに留意し、3 つの電子について考えてみよう。格子点 A の電子のスピンが上向きだとすると、格子点 B の電子スピンは下向きであればエネルギーが下がる。このとき、3 つ目の格子点 C の電子のスピンは、上向きであれば、格子点 B の電子に関してはエネルギーが下がるが、格子点 A の電子に関しては、エネルギーは上がってしまう。逆に、格子点 C の電子のスピンを下向きとしても、状況は同じである。つまり、このような状態は、この 2 つの状態の重ね合わせとなり、格子点 C のスピンの古典的な意味での配置は決まらない、非常に量子論的な状態になる。

このような 3 つの電子の関係は、人間の三角関係になぞらえることができ、このようにうまく定まらない三者の関係にはフラストレーションがあるという。物理の問題の場合は、このような系には、さらに、量子モンテカルロ法が負符号問題のために適用できなくなり、解けなくなるという重要な問題があることが知られている。したがって、フラストレーションを持つハバード模型を研究するには、新しい量子多体問題を解く方法を研究しなくては

ならない。

フラストレーションを研究するには、本稿では議論しないが、一次元系に限るならば、S. Whiteによって発見された密度行列繰り込み群法 (Density matrix renormalization method, DMRG)[6] が、極めて有効であるが、2次元系にはこの方法は今のところ適用できない。2次元系を扱える方法としては、極く最近、経路積分繰り込み群法 (Path integral renormalization group method, PIRG[7, 8]) が提唱されている。この方法は、さらに、著者らがその手法に量子数射影の方法を加えることで、一段と適用範囲が広がってきている [3, 4]。しかしながら、多くの量子数射影を考慮すると著しく計算時間が長くなってしまう。そこで、本稿では、量子数射影された基底を用いた変分法を考察したい。また、これは、量子数射影を加えた経路積分繰り込み群法 [3] の初期基底を生成する方法とみなすことができ、その初期基底の効率的な選択法と考えることができる。

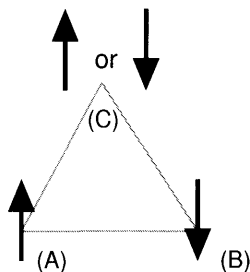


図 4: 三角格子におけるフラストレーションの例

## 1.4 ハバード模型

まずハバード模型を次のように定義する。ハミルトニアンは、

$$H = H_t + H_V + H_U \quad (1)$$

のように3つの項からなる。最初の項は、電子の最近接ホッピング項であり

$$H_t = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.), \quad (2)$$

と定義され、和は最近接格子点間にとり、その強度を  $t$  と書く。ここで  $i$  と  $j$  は、格子点を意味し、 $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) はスピン  $\sigma$  をもつ  $i$ -番目のサイト上の電子の生成 (消滅) 演算子である。次の項は、電子の次近接ホッピング項であり、

$$H_V = - \sum_{\langle kl \rangle \sigma} t' (c_{k\sigma}^\dagger c_{l\sigma} + H.c.) \quad (3)$$

と定義され、和は次近接格子点間でとり、その強度を  $t'$  と書く。この  $t'$  が大きくなるとフラストレーションの効果が大きくなる。3番目の項は、クーロン項で、

$$H_U = \sum_i U \left( n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \cdot \left( n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (4)$$

と定義され、その強度を  $U$  とする。ここでは、格子として  $6 \times 6, 8 \times 8, 10 \times 10, \dots$  を考え、周期的境界条件をとり、電子数はハーフフィルドの場合を考える。

## 2 ハバード模型に対する量子数射影

### 2.1 量子数射影とは

多粒子状態を表す波動関数  $|\phi\rangle$  を考えよう。例えば、それはカノニカル演算子  $a_i^\dagger$  で表される積状態として

$$|\phi\rangle = \prod_i a_i^\dagger |-\rangle \quad (5)$$

と表す事ができる。ただし、カノニカル演算子  $a_i^\dagger$  は、

$$a_i^\dagger = \sum_\alpha D_{\alpha,i} c_\alpha^\dagger \quad (6)$$

と表され、 $D$  は係数である。この係数  $D$  は、例えばハートリー・フォック近似で決めることができる。このような状態  $|\phi\rangle$  は、ほとんどの場合、系のもつ対称性を満たさない。一方、考える系がなにか特別な対称性をもつならば、波動関数もその対称性に対応する量子数演算子の固有状態になる。したがって、系が対称性を持つ場合、対称性をもつ波動関数を扱うことが重要となる。

対称性が壊れた波動関数は、対称性をもついろいろな状態の線形結合で表される。そこで、射影演算子を導入すると、その中の考察している対称性をもつ波動関数の成分を抜き出すことができる。これを量子数射影の方法とよぶ。歴史的には、量子多体系へのそのような射影の方法は、Peierls, Yoccoz と Thouless [9, 10] によって並進対称性や回転対称性の場合に議論された。

一般に、射影演算子  $\mathbf{P}$  は一体演算子の指数関数の和および積分の形で表される。一体演算子を  $O$  と表し、そのウェートを  $w(\beta)$  とすると、射影演算子は、

$$\mathbf{P} = \int d\beta w(\beta) e^{-i\beta \hat{O}_P} \quad (7)$$

と表すことができ、Thouless の定理より、射影された波動関数による行列要素は簡単に求めることができる [1]。

## 2.2 スピン射影

ハバード模型では、全スピンの  $z$  成分は、アップスピンの電子数とダウンスピンの電子数の差で決まり、特に、ハーフフィルドの時は、0 となる。したがって、全スピンの射影演算子は、原子核構造でいうところの軸対称の場合の角運動量射影演算子と同一のものとなり、一次元の積分で表される。すなわち、全スピン  $S$  へのスピン射影演算子  $P^S$  は、

$$P^S = \frac{2S+1}{2} \int_0^\pi d\beta \sin \beta d_{S_0, S_0}^S(\beta) e^{-i\beta S_y} \quad (8)$$

となる [1]。ただし、 $S_y$  はスピン回転演算子の  $y$ -成分であり、 $d_{n,m}^S$  は、Wigner の D 関数といわれるものである。 $S_0$  は上スピンの電子数  $N_\uparrow$  と下スピンの電子数  $N_\downarrow$  の差、すなわち、 $(N_\uparrow - N_\downarrow)/2$  である。また、 $\beta$  は、Euler 角である。

本来、全スピンの  $z$  成分は保存量であるが、この制約を外し試行波動関数の表現空間大きくとることも可能である。そして、これによる対称性の破れは、全スピン射影演算子で回復させるのである。この場合は、 $z$  成分の射影も必要となるので次のような一般的な角運動量射影演算子を利用することになる [1]。全スピン  $S$  状態に射影する全スピン演算子  $P^S$  は、

$$P^S = \sum_k g_K P_{M,K}^S \quad (9)$$

と  $P_{M,K}^S$  を用いて定義される。 $g_K$  は変数であり、後述する最適化の際には変分変数となる。そして、 $P_{M,K}^S$  は、

$$P_{M,K}^S = \frac{1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{M,K}^S(\beta) e^{-i\alpha S_z} e^{-i\beta S_y} e^{-i\lambda S_z} \quad (10)$$

と定義される。ただし、 $S_y$  および  $S_z$  は、スピン演算子  $S$  の  $y$  成分と  $z$  成分である。また、ここに現れる積分は、Euler 角の 3 成分に対しておこなわれる 3 次元積分となり、具体的に表せば、

$$\int d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin \beta \int_0^{2\pi} d\gamma \quad (11)$$

となる。実際にはこの 3 次元積分は数値計算によっておこなう。一次元のスピン射影に較べて、計算量は格段に大きくなるが、昨今、原子核構造の計算では頻繁におこなわれている。ここで現れる 3 次元積分の中の  $\beta$  に関する積分を数値積分でおこなうには、ガウス・ヤコビ積分法を用いるとよいことも知られている。

ハバード模型では、 $S_z$  を保存するスレータ行列式を用いることができる場合は、スピン射影は 1 次元積分ですむが、アップスピンとダウンスピンを混ぜたカノニカル基底が有効になる場合は、3 次元積分が必要となる。これが有効となる重要な例は、別稿で論ずる予定である。

## 2.3 運動量射影

ハバード模型で重要なもう一つの対称性は並進対称性である。これは、運動量の保存を意味するので、運動量射影と呼ぶ。運動量射影演算子  $P^{\vec{k}}$  は、

$$P^{\vec{k}} = \frac{1}{M} \sum_j e^{i(\vec{K}-\vec{k})\vec{R}_j} \quad (12)$$

と表される。ただし、 $M$  は規格化因子であり、 $\vec{K}$  は運動量演算子である。また、 $\vec{k}$  は、射影する運動量ベクトルであり、 $\vec{R}_j$  は  $j$  で指定された格子上のシフト演算子である。この演算子を作用させることで運動量  $\vec{k}$  をもつ波動関数を作ることができる。

サイト数  $N \times N$  の2次元正方格子の場合、運動量射影には  $N^2$  回の行列要素の計算が必要になる。

## 3 量子数射影ハートリー・フォック法

### 3.1 ハートリー・フォック法

カノニカル演算子の積状態、つまり、式 (5) で表される波動関数の範囲内でエネルギーを最小化させる方法はハートリー・フォック法と呼ばれ、変分の形で表現できる。エネルギーの期待値が、 $|\phi\rangle$  の任意の変分に対して

$$\delta \left[ \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right] = 0 \quad (13)$$

を満たすように  $|\phi\rangle$  を定める。

### 3.2 量子数射影ハートリー・フォック法

次に量子数射影をおこなった波動関数に対する変分法を考える。それは、射影演算子およびその組み合わせたものを  $P$  とすると、 $P|\phi\rangle$  に対するエネルギー期待値が  $|\phi\rangle$  の任意の変分に対して

$$\delta \left[ \frac{\langle \phi | HP | \phi \rangle}{\langle \phi | P | \phi \rangle} \right] = 0 \quad (14)$$

と表される。

$|\phi\rangle$  および  $P|\phi\rangle$  に関するこれらの変分は、次にみるように、グラディエント・ベクトルが密度行列によって解析的に表すことができるため、その定式化は容易であるが、射影演算子を導入する場合はその数値計算量は膨大なものとなる。例えば、運動量射影と全スピン射影を行う場合、5次元積分が必要となる。実際に数値計算をおこなうには、変分と射影の順序や射影する対称性について考慮する必要がある。

### 3.3 変分計算の具体的な方法

ハートリー・フォック法や射影ハートリー・フォック法は、1つのスレータ行列式、または、その射影された波動関数によって決まるエネルギー面に対する最小値を求める問題として捉えることができる。その独立変数は、 $N \times N$  サイトでハーフ・フィールドの場合、 $N^4$  個になり、大きなサイトの格子を考えると極めて多くなる。

$|\phi\rangle$  に直交しない任意の波動関数  $|\psi\rangle$  は一般に Thouless の定理より、

$$|\psi(Z)\rangle = e^{Z_{mi} a_m^\dagger a_i} |\psi_0\rangle \quad (15)$$

と表すことができる。ここで、 $m$  は非占有状態を、 $i$  は占有状態を表す。この波動関数より、エネルギー曲面は  $Z$  の関数として、

$$E(Z) = \frac{\langle \psi(Z) | HP | \psi(Z) \rangle}{\langle \psi(Z) | P | \psi(Z) \rangle} \quad (16)$$

と定義される。ただし、射影をしないときは射影演算子  $P$  は除いて考えることにする。ハートリー・フォック解を求めるということは、このエネルギー曲面の最小値を求めるに対応する。

また、エネルギー曲面の  $Z$  に関する 1 階微分は、 $Z \rightarrow 0$  で

$$\frac{\partial}{\partial Z_{m,i}} \langle H \rangle = \langle \psi | H a_m^\dagger a_i P | \psi \rangle \quad (17)$$

と表すことができる。右辺の射影行列要素は、Wick の定理により、密度行列を使った解析的な標識で表すことができ、数値計算できる [1]。つまり、グラディエント・ベクトルの標式を求めることができ、変数  $Z$  に関する傾斜法による最適化計算がおこなえる。

#### 3.3.1 傾斜法

グラディエント・ベクトルが求められるときの最適化法にはいくつかの手法が知られている。その最も簡単な方法が傾斜法である。

傾斜法とは、パラメーター空間上に定義されたエネルギー曲面をその勾配の方向に下がっていくことでエネルギーの最小値（極小値）を求める方法である。まず、エネルギー曲面の出発点を決め、その点でのグラディエント・ベクトルを求め、次の点をグラディエント・ベクトルの逆方向上にとるという過程を繰り返すことでエネルギーの最小値（極小値）を求める。また、傾斜方向にどれだけ下がればよいかという問題は、1次元の最適化に帰着するので、黄金比を用いた次元サーチを用いる。この方法は非常に単純で、簡単にインプリメントできる。

#### 3.3.2 準ニュートン法

エネルギーを最小にするという問題で重要なのは、できるだけ少ない計算量で最小値を見つけることである。それには、ニュートン法といわれる 2 次の微分量で定義されるヘシ



アン行列を用いる方法が知られている。しかしながら、これはヘシアン の計算量が莫大となるため、やさしい問題を除けば利用できない。現実的な問題を解くためには、準ニュートン法といわれる方法がよく用いられる。この方法では、ヘシアンを2階微分により求めるのではなく、簡単に求められるベクトルを用いて近似的に表すものであり、計算量は階段に少なくなる。また、この方法は、物理学のみならず、工学、経済学など幅広い分野で利用されるものである。

次に、このような特徴をもつ準ニュートン法のアルゴリズムをみていく。ある多次元ベクトル  $x$  の関数  $f(x)$  を  $x = x_0$  のまわりに次式のように展開する。

$$f(x_0 + \delta x) \approx f(x_0) + \nabla f(x_0)\delta x + \frac{1}{2}\delta x H(x_0)\delta x + \dots \quad (18)$$

ここで、 $H(x_0)$  はヘシアンであり、

$$H(x_0)_{\rho\sigma} = \frac{\partial}{\partial x_\rho} \frac{\partial}{\partial x_\sigma} f(x)|_{x=x_0} \quad (19)$$

と定義される対称行列である。この固有値により、 $x = x_0$  近傍の曲面の様子が決まる。この対称行列の固有値がすべて正であれば、極値となる。

ここで、極値の近傍を考え、2次までの展開を考える。ヘシアンが数値的に評価できる場合は、この解は、

$$\delta x = -H(x_0)^{-1}\nabla f(x_0) \quad (20)$$

によって与えられる。この標式に基づく解法は先に述べたニュートン法である。2次形式で表される曲面であれば、当然ではあるが、一回の操作で解が求まる。しかしながら、一般に2階微分を伴うヘシアンを数値的に評価できる場合は非常に限られている。

本論文で扱う射影ハートリー・フォック法では、2階微分はかなり複雑になるが、密度行列によって解析的に書き下すことはできる。しかし、その計算量は膨大であり、それを数値的に評価するのは非現実的である。また、2次元格子のサイト数を  $N \times N$  とすると、独立変数は、 $N^4$  個となる。例えば、 $N = 10$  の格子になると、独立変数は一万という膨大な数になる。ヘシアンが対称行列であることを考えても  $N^4(N^4 - 1)$  個の2階微分を数値的に評価するのは、不可能である。

そこで、実際の問題を扱うにあたり、このヘシアン の逆行列を近似的に求めることが重要となる。それが準ニュートン法といわれるもので、その逆行列の近似的な求め方にはいくつかのアルゴリズムが存在する。その有名なものは、DFP法、BFGS法、SR1法である。本研究では、この3種類の方法をインプリメントしたが、大きな格子では、 $l$ -BFGS法 [11] と呼ばれる方法が計算機のメモリーの問題から必須となるので、ここでは、BFGS法および  $l$ -BFGS法を取り上げる。

### 3.3.3 BFGS法と $l$ -BFGS法のインプリメント

BFGS法はよく知られた方法であるので簡単にまとめておく。変分パラメータ空間のベクトルを  $x$  とし、逐次計算で更新していく過程を考える。 $k$  回目の  $x$  を  $x_k$  と表し、その時

のヘシアンの逆行列を  $B_k$  とすると、

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k B_k \nabla f(x_k) \quad (21)$$

となる。 $\lambda_k$  は一次元の最適化によって求める。このとき、ヘシアン逆行列  $B_k$  を、

$$B_{k+1} = U_k B_k U_k + \rho_k s_k s_k \quad (22)$$

のように更新するのが BFGS 法である。ただし、 $s_k$  と  $y_k$  は、

$$s_k = x_{k+1} - x_k \quad (23)$$

$$y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \quad (24)$$

と定義される量である。また、 $\rho_k$  は、

$$\rho_k = \frac{1}{y_k s_k} \quad (25)$$

と定義され、 $U_k$  は、

$$U_k = 1 - \rho_k y_k s_k \quad (26)$$

と定義される。この更新アルゴリズムに従って計算していくと、経験的にヘシアンに近い近似が得られる。

小さい格子サイズの問題では、この BFGS 法のアルゴリズムで計算できるが、格子サイズが大きくなると、式 (22) の部分が数値計算上問題となる。 $s_k$  や  $y_k$  から  $B_k$  は求められるが、 $B_k$  が密行列になるため、次元の 2 乗個の行列要素を記憶する必要が生じる。例えば、 $10 \times 10$  の問題であれば、自由度は  $10^4$  になるので、 $10^8$  個の行列要素をストアする必要があり、コンピュータのメモリー上の問題が生じる。

しかしながら、式 (22) は再帰的に解くことができることに着目すると、若干の計算量は増えるが、式 (21) と式 (22) より、 $x$  の更新の計算には露に行列  $B$  を扱う必要はない。さらに、経験的には、完全に再帰的に解かなくとも、過去  $m$  回 ( $m = 5 \sim 10$ ) の逐次計算によるベクトルさえ保持し、それから近似的に求めれば実用上は十分であることが多い。この 2 点を加えた方法を limited memory BFGS ( $l$ -BFGS) 法という。ハバード模型では大きな格子サイズの問題を取り扱いたいので、この  $l$ -BFGS 法まで考慮する必要がある。

## 4 量子数射影ハートリー・フォック法による計算例

本節では、これまで述べてきた量子数射影ハートリー・フォック法をハバード模型に実際に適用した例をみていく。ここでは、 $U = 4, t = 1, t' = 0$  の場合の最近接ホッピングのみを

考えたハバード模型を取り上げ、 $6 \times 6$ の正方格子、ハーフフィールドの場合を考える。この系の詳細な結果は、論文 [3] の図 4, 5にあるのでそれと比較する。

この論文によると、経路積分繰り込み群法によるこの系での基底状態のエネルギーは、 $-66.88[3]$ であり、一方、量子モンテカルロ法によるものは、 $-66.8664 \pm 0.0504[3, 12]$ である。二つの計算結果は、極めてよい一致を示している。このようにこの系はすでに正確な基底状態エネルギーがわかっているのので、これをベンチマークとして、量子数射影ハートリー・フォック法によって、より少ない計算量でどこまで正しく計算できるかを考えていく。

ハートリー・フォック法は、変分として定式化され、前節で述べた傾斜法や準ニュートン法によってエネルギーの最小値を求めることで解くため、一回の計算では真の最小値を得たかどうか判断できないという問題がある。つまり、傾斜法や準ニュートン法によって得られるエネルギーは、極小値に過ぎない。実際に数値計算をおこなうと、ハートリー・フォック法の初期基底の選び方によって得られる極小値の値は異なる。そのため、最小値を求めるには、数多くの様々な初期基底から得られる極小値を比較する必要がある。このように求めると、この系でのハートリー・フォックのエネルギーは  $-64.60$  になる。

次に、量子数射影ハートリー・フォック法について考えてみよう。これは量子数射影を除けば、ハートリー・フォック法と同じアルゴリズムなので、最小値を得るには同様にすればよい。しかし、量子数射影をおこなうとその積分を実行するため計算量が著しく増大するため、格子サイズが大きくなると最小値を求めるのに十分な回数の計算をすることは困難になる。そこで、本研究では、反磁性状態 (図 2 a) や、ストライプ状態 (図 2b) を効率よく求める方法を考案した。

数値計算によれば、この系でのハートリー・フォック解は反磁性を示すものであり、その解の状態をスピン運動量射影した状態のエネルギーは、 $-65.27$  になる。また、これを初期基底としてスピン運動量射影をしたハートリー・フォックはすぐに収束し、そのエネルギーは  $-65.29$  になる。つまり、射影しないハートリー・フォック解の状態はほぼ射影空間でも極小値になっていることがわかる。

次に、射影空間でのより低いエネルギー値を示す極小値を見つけるための方法を考える。まず、ハートリー・フォック法によってエネルギー最小の解をみつける。そして、このエネルギーに対する状態と大きくは違わないが、異なる状態を作り出すために、この状態の基底関数に大きさをコントロールした形でランダムな値を

$$D_{\alpha,i} \leftarrow D_{\alpha,i} + \lambda R_{\alpha,i} \quad (27)$$

のような形で加える。 $R_{\alpha,i}$  は一様乱数で、 $\lambda$  はその強さである。

次に、この  $\lambda$  によってわずかに変化された基底を初期基底として、運動量射影ハートリー・フォック法をおこなう。 $\lambda$  が小さいうちは、 $\lambda = 0$  のときと同じ状態に収束するが、 $\lambda$  がある値を越えるとエネルギーがより小さい新たな極値に収束するようになる。そして、その基底を初期基底として、スピン運動量射影ハートリー・フォック法をおこなうと、先ほどとは異なるよりエネルギーの低い極小値に収束することがわかる。実際に計算すると、 $-66.15$  になり、さきほどの  $-65.29$  よりも著しく改善されることがわかる。

ここでは、計算量を減らすために、中間の計算は、運動量射影のみでおこなった。しかし、この中間の計算をスピン射影のみでおこなうとエネルギーの低い新しい状態は出てこない。よりエネルギーの低い状態を見つけるには、運動量射影空間で探索することが重要であることがわかる。また、ここで示した計算方法は、反磁性以外にも、次近接相互作用をもつ系に現れるストライプ相 [4] や構造の異なる反磁性相 [4] に対しても、パラメータの幅広い範囲で、同様にうまくいくことが確認できた。

本稿では、量子数射影ハートリー・フォック法によるハバードモデルの解き方を詳説し、特定の相に対して有効な解法をについて述べた。この方法は、そのまま多数基底にも拡張でき、さらに経路積分繰り込み群法とも関連する。それについては、別稿で論じたい。

## 謝辞

本研究の一部は、平成 18 年度専修大学研究助成「量子多体問題に対する計算物理的な方法論の研究」および、平成 19 年度専修大学在外研究の成果である。

## 参考文献

- [1] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, (Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin, 1980).
- [2] M. Onoda, T. Mizusaki, T. Otsuka and H. Aoki, *Proc. 25th Int. Conf. on Physics of Semiconductors* ed. by N. Miura and T. Ando (Springer, Berlin, 2001), p. 939.
- [3] T. Mizusaki and M. Imada, *Phys. Rev. B* 69, 125110 1-10 (2004).
- [4] T. Mizusaki and M. Imada, *Phys. Rev. B* 74, 14421 1-11 (2006).
- [5] For example see, M. Imada and Y. Hatsugai, *J. Phys. Soc. Jpn.* 58, 3752-3780 (1989).
- [6] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* 69, 2863 (1992).
- [7] M. Imada and T. Kashima, *J. Phys. Soc. Jpn.* 69, 2723-2726 (2000).
- [8] T. Kashima and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* 70, 2287-2299 (2001).
- [9] R. E. Peierls and J. Yoccoz, *Proc. Roy. Soc. A* 70, 381-387 (1957).
- [10] R. E. Peierls and D. J. Thouless, *Nucl. Phys.* 38, 154-176 (1962).
- [11] D. C. Liu and J. Nocedal, *Mathematical Programming* B45, 503-528 (1989),
- [12] F.F. Assaad, private communication.