

Title	二次元量子スピン系のテンソル積変分法による解析 (2004年度後期基礎物理学研究所研究会「モンテカルロ法 の新展開3」,研究会報告)
Author(s)	西尾, 幸暢; Gendiar, Andrej; 西野, 友年
Citation	物性研究 (2005), 85(3): 399-403
Issue Date	2005-12-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/110373
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

二次元量子スピン系のテンソル積変分法による解析

神戸大学 理学部 西尾 幸暢¹, Andrej Gendiar, 西野 友年

1 テンソル積変分法

二次元量子スピン系がまだ十分に理解されていない理由の一つとして、負符号問題を解決する手法が十分に確立されていないことが挙げられる。一次元量子スピン系では、負符号問題による制限を受けない手法として、密度行列繰り込み群の方法 (DMRG)[1] が知られている。二次元系を一次元系にマップして直接 DMRG を適用することが試みられているが、小さな系を除いてあまり良い結果は得られていない。

DMRG の固定点での波動関数は、熱力学極限 ($N \rightarrow \infty$) において次のような行列積の形に等しくなることが知られている [2]。

$$\psi(s_1 \cdots s_N) = \text{Tr} (A[s_1]A[s_2] \cdots A[s_N]) \quad (1)$$

我々は二次元系に対して行列積波動関数考え方を拡張する事で、新たな数値計算の手法を構成できないだろうかと考えている。

以下に手法の詳細について述べる。まず、二次元量子系の試行波動関数を適当な局所テンソルの積の形に仮定する。次に様々なパラメータを局所テンソルに与え、それに対する変分エネルギーを計算する。これによって変分原理から基底エネルギーの上限を見積もることができる。同等な手法は既に三次元古典系の転送行列に対して導入されており [3]、テンソル積変分法 (TPVA) と呼ばれている。

2 定式化

2.1 モデル

二次元正方格子上的 $S = \frac{1}{2}$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルを考える。相互作用は最近接サイト間にはたらくとする。ハミルトニアンは次で与えられる。

$$H = \sum_{i,j=1}^{N-1} (\mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1} + \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j}) \quad (2)$$

以下では便宜上、 $N \times N$ の有限系に対して話を進めるが、実際には $N \rightarrow \infty$ の極限を考える。

¹ E-mail: nishio@kobe-u.ac.jp

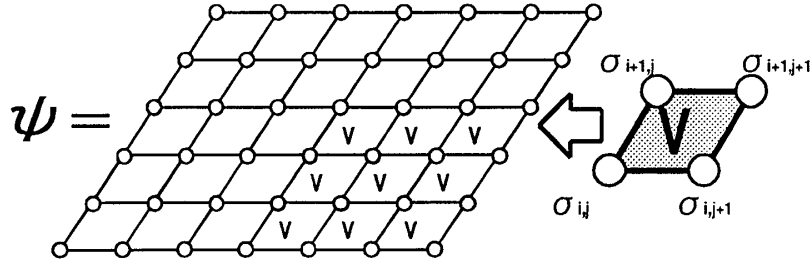


図 1: 2×2 の局所テンソルで構成された試行波動関数のグラフ表現。○はスピン変数 (\uparrow または \downarrow) を表している。

2.2 テンソル積波動関数のミニマム構成

始めに、 2×2 の有限系の自由度を持つ関数 V を局所テンソルとして定義する。ある単位格子の 4 つのスピン変数を $s_{i,j}$ $s_{i,j+1}$ $s_{i+1,j}$ $s_{i+1,j+1}$ とすると、 V は

$$V \begin{bmatrix} s_{i+1,j} & s_{i+1,j+1} \\ s_{i,j} & s_{i,j+1} \end{bmatrix}$$

と表せる。次に、 $N \times N$ の二次元系の任意のスピン配列 $s_{1,1}$ $s_{1,2} \cdots s_{N,N}$ に対する波動関数 ψ を V を用いて次式のように定義する。

$$\psi(s_{1,1} s_{1,2} \cdots s_{N,N}) = V \begin{bmatrix} s_{2,1} & s_{2,2} \\ s_{1,1} & s_{1,2} \end{bmatrix} V \begin{bmatrix} s_{2,2} & s_{2,3} \\ s_{1,2} & s_{1,3} \end{bmatrix} \cdots V \begin{bmatrix} s_{N,N-1} & s_{N,N} \\ s_{N-1,N-1} & s_{N-1,N} \end{bmatrix} \quad (3)$$

式 (3) の右辺における V の積は全ての単位格子の 4 つのスピンについてとる (図 1)。これは正方向格子に対するテンソル積波動関数のミニマムな表現を与える。 ψ の自由度は V の自由度と同じ 2^4 個である。さらにハミルトニアンの特称性より V のパラメータは次の 4 個になる。

- $V \begin{bmatrix} \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \uparrow \end{bmatrix}$ とそのスピン変数の反転
- $V \begin{bmatrix} \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \downarrow \end{bmatrix}$ とそのスピン変数の反転、x-y 面内の回転
- $V \begin{bmatrix} \downarrow & \downarrow \\ \downarrow & \downarrow \end{bmatrix}$ とそのスピン変数の反転
- $V \begin{bmatrix} \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow \end{bmatrix}$ とそのスピン変数の x-y 面内の回転

2.3 変分エネルギーの計算

次に、変分エネルギーの計算について説明する。 $N \rightarrow \infty$ の極限で試行波動関数が並進対称であることから、1 ボンド当たりの変分エネルギーは系のどこか 1 箇所のボンドに対する変分エネルギー

$$\lambda_1 = \frac{\langle \psi | H_c | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (4)$$

と等しくなる。 H_c は例えば $S_{\frac{N}{2}, \frac{N}{2}} \cdot S_{\frac{N}{2}, \frac{N}{2}+1}$ である。

λ_1 の分母の計算

式(4) の分母を変形して式(3) を代入すると

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{s_{1,1} s_{1,2} \dots s_{N,N}} \left\{ V \begin{bmatrix} s_{2,1} & s_{2,2} \\ s_{1,1} & s_{1,2} \end{bmatrix}^2 V \begin{bmatrix} s_{2,2} & s_{2,3} \\ s_{1,2} & s_{1,3} \end{bmatrix}^2 \dots V \begin{bmatrix} s_{N,N-1} & s_{N,N} \\ s_{N-1,N-1} & s_{N-1,N} \end{bmatrix}^2 \right\} \quad (5)$$

となる。式(5) は局所ボルツマン重率が V^2 で与えられる二次元 IRF モデルの分配関数と同等な形である。今回は、二次元古典系に対する DMRG の手法の一種である、角転送行列繰り込み群 (CTMRG)[4] を用いて計算した。

λ_1 の分子の計算

式(4) の分子に式(3) を代入して計算すると、分母と同様に二次元古典系の分配関数と同等な形に変形できる。分子が分母と異なる点は、 H_c で表される局所的な相互作用が含まれていることである。そのために分子の表式は複雑になる(図2)が、分母の計算において得られる分配関数の部分和をうまく組み合わせる事で計算できる。数式は省略する。

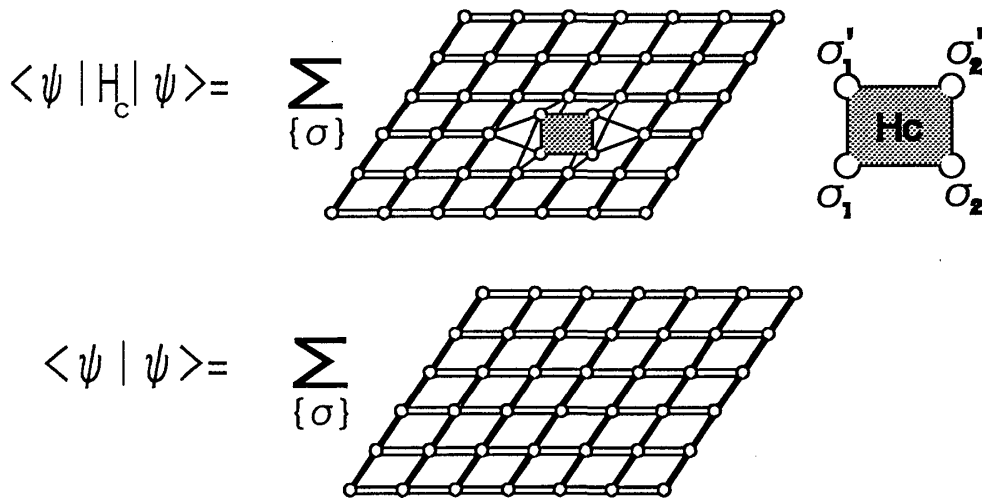


図2: 変分エネルギーの分子、分母のグラフ表現。 $\sum_{\{\sigma\}}$ は全てのスピン変数に対して和をとることを表している。

2.4 局所テンソルの拡大

局所テンソルの定義をより大きなクラスターに拡大することで、テンソル積波動関数のパラメータ空間を大きくすることができる。これにより近似精度を系統的に上昇させることができる。今回は図3に示す様に 3×3 、 4×4 の2種類の拡大を考える。

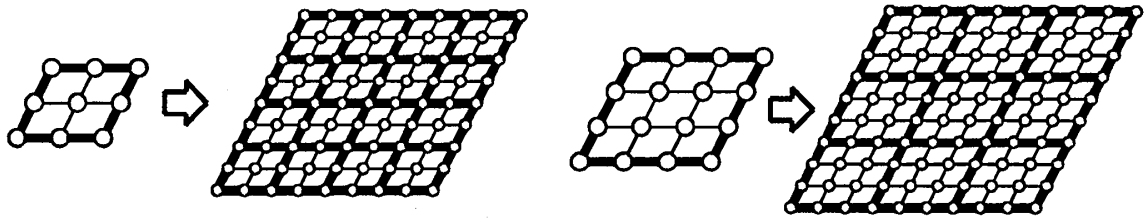


図 3: 3×3 、 4×4 の局所テンソルから構成されるテンソル積波動関数のグラフ表現。

3 結果と考察

パラメータ最適化の結果得られた変分エネルギーの一覧を表 1 に示す。今回の計算によって、次のことが分かった。

- クラスタサイズ拡大につれて、ゆるやかな精度の向上が見られる。(モンテカルロ法の値と比べて、 2×2 では +2.3%、 3×3 では +1.6%、 4×4 では +1.2% の精度。)
- 計算時間は急激に増加する。 $(2 \times 2$ では数秒、 3×3 では数分、 4×4 では数日の計算が必要。)

これらの結果から、局所テンソルを空間的に拡大しても、計算量の増加に見合った計算精度の向上は期待できないと考えられる。

局所テンソル	パラメータ数	変分エネルギー
2×2	4	-0.327,228
3×3	51	-0.329,461
4×4	4324	-0.330,709
QMC	-	-0.334,72

表 1: $S = \frac{1}{2}$ 正方格子反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底エネルギー (1 ボンドあたり) のテンソル積変分法による見積もり。QMC は Lin らによる量子モンテカルロ法の値 [5]。

4 今後の課題

今後我々は、今回導入したテンソル積変分法をフラストレーションの強い二次元量子系 (具体的には $J_1 - J_2$ モデル) へ適用することを考えている。 $J_1 - J_2$ モデルでは、 $J_2/J_1 \simeq 0.5$ で強いフラストレーションのために古典的な秩序が消失することが指摘されている [6]。実際に今回説明したミニマム構成の試行波動関数を用いて計算を試みたところ、 J_2/J_1 の全領域で古典的な秩序を持った状態が得られた。その結果として、得られる変分エネルギーの精度は他の方法によって見積もられているものと比べ、非常に悪くなることが分かった。

この問題を解決するために、図4に示すような新たなテンソル積波動関数の表現を用いることを考えている。特に右は $m = 2$ で VBS 波動関数のパラメータ領域を含んでおり、また反強磁性的、直線的な古典的秩序状態も表現しうることから、有効であると考えている。ところがこれらの試行波動関数を用いる場合、計算すべき古典系は必然的に負かつ非対称な局所ボルツマン重率を持つことになり、そのような場合密度行列繰り込み群による計算がうまく行かないことが多いことが分かった。現在の課題は、分配関数計算の困難を他の手法によって解消することである。

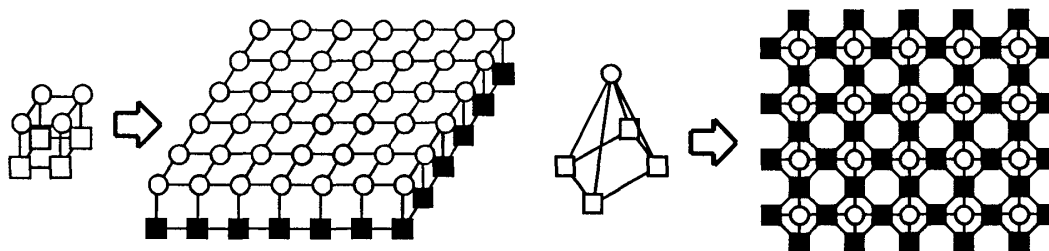


図4: 補助変数を持つ局所テンソルと、それから構成されるテンソル積波動関数のグラフ表現。○はスピン変数、□は m 状態の補助変数を表している。また■はその変数について和をとることを表している。

参考文献

- [1] Steven R. White, Phys. Rev. B **48**,10345 (1993) ; Steven R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992)
- [2] Stefan Rommer and Stellan Östlund, Phys. Rev. B **55**, 2164 (1997)
- [3] T. Nishino et al., Nucl. Phys. **B575**, 504 (2000) ; T. Nishino et al., Prog. Theor. Phys. **105**, 409 (2001)
- [4] T. Nishino and K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 891 (1996)
- [5] H. Q. Lin, J. S. Flynn and D. D. Betts, Phys. Rev. B **64**, 214411 (2001)
- [6] V. N. Kotov et al., Phys. Rev. B **60**, 14613 (1999) ; O. P. Sushkov, J. Oitmaa, Z. Weihong, Phys. Rev. B **63**, 104420 (2001)