スピン系と量子モンテカルロ

1990年８月３～４日の２日間、東大物性研の高橋實氏によって、『スピン系と量子モンテカルロ』というテーマで講義が行われました。その概要を講義の流れに沿ってまとめると以下のようになります。

§１．数値計算の方法と量子モンテカルロ

量子系のHamiltonian は一般にHermitc 行列で表される。その基底状態や有限温度での物理量の期待値を計算する方法として、厳密な対角化の方法、べき乗法、Lanczos 法、今田・高橋の方法等がある。
また、計算機のメモリーの都合でこれらの方法では取り扱えないような大きな系を扱う場合の方法として、量子モンテカルロ法がある。この場合、２次元以上のFermion 系や三角格子反強磁性Heisenberg模型では負符号問題が現れ、計算が困難である。
しかし、Boson 系やフラストレーションのないスピン系では古典系と同じ位の精度で計算ができる。この負符号問題にわずらわせられないで済む量子系の問題として、液体 ^{4}Ｈｅの問題があり、量子モンテカルロ法で低温の現象をうまく説明することができる。

§２．スピン波の理論

《強磁性》

Ｓ＝1/2 、１次元の問題はBethe-ansatzの方法により厳密に解かれているが、スピン波理論の結果は、自由エネルギーの最低次の項が厳密解と一致している。このことは、何らかの意味でスピン波理論が成立していることを意味している。
そこで、化学ポテンシャルを導入することによって、従来の理論で困難のあった赤外発散の問題を解決し、スピン空間での回転非対称を回転平均操作によって解決した。この方法によると、二点相関関数、帯磁率、エネルギーが計算でき、１次元系ではBethe-ansatzによる低温での結果と大変よく一致し、２次元系では相関距離、帯磁率等の結果が繰り込み群の結果と同じくexp(Ａ／Ｔ）の形になる。

《反強磁性》

強磁性の場合と同様のスピン波理論が適用できると考えられる。２次元正方格子の問題は高温超伝導の問題と関連しているが、スピン波理論はうまくいく。
しかし、１次元の場合はHaldane gap の問題があり、複雑である。

§3. S＝1/2 とS＝1の1次元反強磁性体

上述の反強磁性スピン波の理論を1次元系に適用すると、基底状態と第1励起状態の間に常にgap を持つ。これは、Haldane gap に対しては大変都合がよい。
しかし、S＝1/2 のBethe-ansatzによる厳密解と矛盾する。
一方、厳密な対角化の方法では、S＝1/2 ではN＝24まで、S＝1ではN＝16まで行われている。量子モンテカルロ法では更に大きな系を扱うことができる。この方法での励起スペクトルの計算はS＝1/2 、N＝32ではBethe-ansatzの結果とよく一致する。また、S＝1、N＝14では対角化の方法と一致する。S＝1、N＝32では基底状態と第1励起状態の間にgap を持ち、二点相関関数は指数関数的に減衰する。このことは、Haldane gap の存在に対して大変肯定的な結果である。

担当者
阪大・基礎工　鈴木政勝