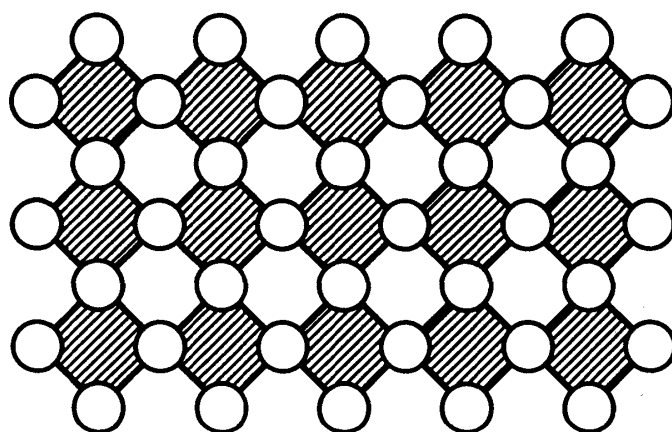


2次元量子スピン系基底状態のテンソル積変分による評価

神戸大学理学部・西野友年

2次元量子系の基底状態について、そのエネルギー上限を変分的に評価することを考えよう。変分関数の候補は色々と考えられるけれども、まずは、古典系に対する Kramers-Wannier 近似と同様に、局所的な (ボルツマン) 重率の積として変分関数を表そう。こうしておけば、変分エネルギーが示量的 (Extensive) になり、都合が良いからだ。

さて、2次元量子系の代表的な例として、正方格子ハイゼンベルグ模型を考えよう。格子を下図のように 45 度回転させて、



相互作用は「アミかけ」したプラケット周囲の 4-スピン間相互作用として取り扱うことにする。もちろん、4-スピン間相互作用は 2-スピン相互作用の和に分割できる。

このハミルトニアンに対して、変分関数の構成は次のようにして行なう。まず各プラケットに対して、負の値も取り得る 16 状態の重率を割り当てる。次に、重率の 2 次元的な積を取ることで無限に広い全系の変分関数を作成する。要するに、古典的な 16-vertex Model を変分関数として採用するのだ。系のスピン反転対称性、90 度回転 (反) 対称性などを考慮すると、16 の変分パラメーターの内、独立なものはたった 3 個であることがわかる。

ハミルトニアンと変分関数のセットが与えられた所で、3つの独立なパラメーターを振って、変分エネルギーの極小値を求めてみたところ、QMCによって知られている基底エネルギーに対して、+3% 程度の "精度" で基底エネルギーの近似値が求められた。変分エネルギーの評価は、角転送行列繰り込み群 (CTMRG) により行なった。

最後に、改善すべき問題点を幾つか挙げておく: (a) 変分関数が明示的に系の並進対称性を破っているのので、これを回復するよう IRF 模型により変分関数を与える方が良いだろう。(b) 系の $SU(2)$ 対称性をなるべく壊さないような変分関数を作る必要がある。(c) 計算精度を上げる為に、変分関数への補助場の導入が不可欠である。(d) そもそも正方格子ハイゼンベルグ模型では誰も「驚いて」くれないので、フラストレートした模型の変分評価を行なうべきである。

参考文献 URL: <http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/nishi/publist.html>