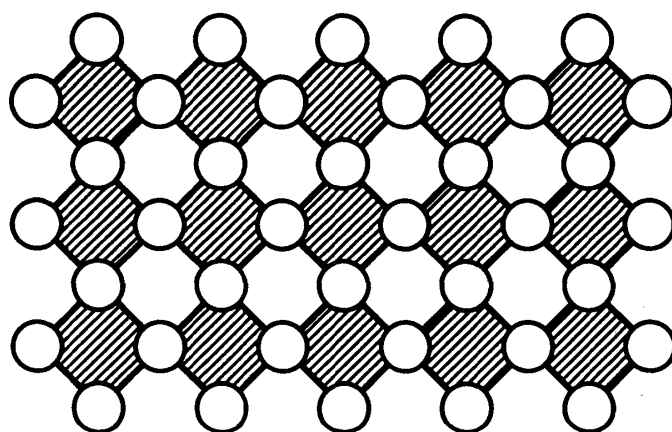


2次元量子スピン系基底状態のテンソル積変分による評価

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によって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を、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さだろう。(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>