

图2 砷离子注入硅的介电函数实部 ϵ_1 的 $3/2$ 次微分谱

与之相应的振动模式称为分维子。分维子维度与分维一般并不相等,但有一定关系。

半导体中许多过程与电子或空穴的能带结构和性质有关,光性与电性方面尤其是这样。对半导体的维度及维度转变的研究,至今还不

够充分。这里提出个问题:有没有与电子某些性质相关的“维度”呢?原则上说,这种维度可以不同于分维或分维子维度。何星飞提出一个抽象的“分数维度空间”^[6],用来近似描述真实空间中某些元激发的各向异性。引入一个与 Bloch 能带电子有关的“分数维度”(fractional dimension)。根据联合态密度 $G(E)$ 的公式

$$G(E) = \frac{2}{\Gamma(\alpha/2)} \left[\frac{m_{vc}}{2\pi\hbar^2} \right]^{\alpha/2} (E - E_g)^{\alpha/2-1} \quad (8)$$

定出的 α 便是分数维度的值。其范围在 $0 \leq \alpha \leq 3$ 。这个概念和相应的方法,可望用于低维系统或维度转变问题的研究。这样,光频介电函数谱(特别是分数微分谱)将提供一种新的量度和研究维度的方法。

- [1] K. B. Oldham and J. Spanier, *The Fractional Calculus*, Academic, New York, (1974).
- [2] He Xingfei and Mo Dang, *Chinese Phys. Lett.*, **3**(1986), 565.
- [3] 何星飞,莫觉,物理学报, **36**(1987), 1624.
- [4] X. F. He, *Solid State Commun.*, **61**(1987), 53.
- [5] Xingfei He et al., *Phys. Rev. B*, **41**(1990), 5799.
- [6] Xingfei He, *Phys. Rev. B*, **42**(1990), 11751.

量子蒙特卡罗方法及其应用¹⁾

张保安²⁾ 姚凯伦

(华中理工大学物理系,武汉 430074)

量子体系的蒙特卡罗研究近十多年来非常活跃,并取得了许多富有意义的成果。量子蒙特卡罗方法愈来愈受到人们的关注。本文结合量子蒙特卡罗方法的建立和发展介绍了它的基本思想。在对几种具体方法作介绍的同时,还分析了它们特点。文中还对超导、主要是高温超导电性研究中的一些有益的量子蒙特卡罗工作作了介绍。最后讨论了量子蒙特卡罗方法存在的主要问题,并展望了量子蒙特卡罗方法的发展前景。

随机试验方法早在 18 世纪就已被人们所认识,但用该方法时,要想获得较高精度的结果需要大量的试验。所以在计算机出现之前,要真正进行随机试验几乎不可能。

本世纪 40 年代,美国著名物理学家和数学

家 Von Neumann 及其合作者在曼哈顿工程中为了模拟中子链式反应,设计了随机试验的第一个计算机程序,并在世界第一台计算机

1) 国家自然科学基金资助的项目。

2) 现在通讯地址:河北地质学院基础部,石家庄,050031。

MANIAC 上对中子链式反应作了随机模拟,然后作出统计处理。为保密起见,他们把这种方法称为蒙特卡罗 (Monte Carlo——举世闻名的赌城)方法。

1953年, N. Metropolis 等人^[1]首次应用蒙特卡罗方法研究了一个刚球气体模型的态方程问题。他们所用的方法后来被称为经典蒙特卡罗方法,有时直接称为 Metropolis 方法。

蒙特卡罗方法也称随机模拟方法,它是一种随机抽样技术或统计试验方法。它构思独特,在很多领域都有极其重要的应用价值。随着计算机技术的发展,蒙特卡罗方法在物理学中得到广泛而系统的应用^[2]。在一些随机性物理问题,象放射性衰变、布朗运动等的研究中充分体现了它的优越之处。它在很多定性物理问题,诸如自旋玻璃、渗流^[3]等的研究中也是非常有用的。对随机性物理问题,蒙特卡罗方法的计算过程就是用数学方法模拟实际的物理过程。在用蒙特卡罗方法解决定性问题时,首先要建立一个与问题相关的概率统计模型,使这个模型的概率分布或期望值就是问题的解。在模拟过程中对这个模型作随机抽样,最后得出的算术平均值就是所求问题的近似解。

零温下量子体系的数值模拟工作在量子力学建立之后不久就开始了;然而在有限温度下,除了具有特殊对称性的各向同性的海森堡模型外,一般量子体系的蒙特卡罗模拟则被认为是一个十分困难的问题。用蒙特卡罗方法处理量子体系是经过很多物理学家的努力,近十多年来才逐步发展、完善起来。

一、量子蒙特卡罗方法的基本思想和量子维数

量子体系与经典体系一个很大的差别就是量子体系算符间存在非对易关系,这使量子体系的蒙特卡罗模拟十分困难。不过若能通过一定的变换把某种量子体系等价为一个易于用蒙特卡罗方法处理的经典体系,那么问题就可迎刃而解。

伊辛体系的蒙特卡罗研究;在60年代就已很成熟。本世纪70年初,物理学家首先发现在数值关系上附加了横向场的 d 维伊辛模型(最简单的量子模型)与 $(d+1)$ 维伊辛模型基态性质的等价性。稍后人们通过幂级数展开计算了磁化率,验证了上述结论。日本物理学家 M. Suzuki 证明了线性 X-Y 模型与二维伊辛模型基态性质的等价性。

以上工作使物理学家受到很大的启发,一般量子体系与伊辛体系是否也具有这种等价关系呢?

1977年, M. Suzuki 等人^[4], 基于广义 Trotter 近似算符公式

$$e^{A_1+A_2+\dots+A_p} \simeq [e^{A_1/n} e^{A_2/n} \dots e^{A_p/n}]^n, \quad (1)$$

证明了: d 维量子自旋体系的基态等价于一个一定的 $(d+1)$ 维多体相互作用的伊辛体系,并且 d 维量子自旋体系的配分函数可以用一个适当的 $(d+1)$ 维多体相互作用的伊辛体系的配分函数来表示。这两个结论为量子体系的蒙特卡罗研究打下了坚实的理论基础。

上述变换中所增加的维数起着量子效应,称为量子维数或 Trotter 方向,有时也称作虚时间轴。它代表了局域哈密顿算符的非对易效应或分立空间的路径积分作用。在图1中,我们把一个 d 维量子体系转换为包括新的相互作用的 $(d+1)$ 维经典体系。阴影表示多体相互作用。

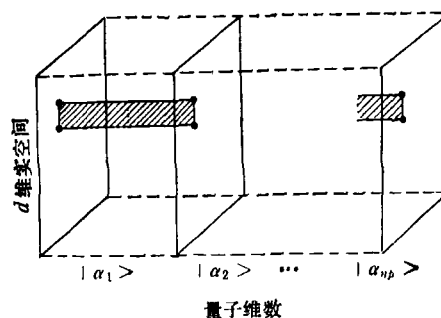


图1 转换为 $(d+1)$ 维多体相互作用的晶格

现在我们可以清楚地看到,对于一个量子体系,首先我们设法找到一种变换把它等价为一个 $(d+1)$ 维经典体系,然后对 $(d+1)$ 维

经典体系进行蒙特卡罗模拟。这种方法就称为量子统计蒙特卡罗方法，简称量子蒙特卡罗方法。

在进行实际模拟前，要先建立一个与体系相关的概率模型(这可通过配分函数求出)和物理量的计算公式。模拟中采用的算则主要有两种，Metropolis 算则和热浴 (heat-bath) 算则。设 R 是与系综组态变化相关的量。为了决定是否接受一个新的组态，如拿 R 与随机数比较，这种算则是 Metropolis 算则；若取

$$P = \frac{R}{1+R}$$

与随机数比较，以便决定是否接受新的组态，这种算则是热浴算则。当然对不同的情况要采用合适的算则。对费米体系多采用热浴算则。

现在我们对蒙特卡罗模拟作一物理图象的描述。大家知道，对系综来说一次性产生大量的组态与多次性一次产生一个组态是等价的。在计算机上我们就是多次性随机地一次产生一个新的组态。如何使模拟中计算得到物理量有意义，这要由采用的抽样技术和算则来保证。在开始，我们可随意给定初始组态。应用重要抽样技术 (importance sampling technics) 和热浴算则后，经过一定次数的预热过程总可以使系综达到平衡态，并且可使抽到某个组态并计算系综在此分布下物理量的几率总是正比于该组态在系综中出现的几率。

M. Suzuki 早期用量子蒙特卡罗方法研究了一维量子体系、X-Y 模型，并对 Hubbard, Kondo 模型作了量子蒙特卡罗可行性研究。他还对量子蒙特卡罗方法做了很多开创性工作^[5]。80年代初，J. E. Hirsch^[6] 等人对 M. Suzuki 的思想做了进一步的改进和发展，把量子蒙特卡罗方法成功地用于费米体系的研究中。基于 Trotter 公式，他们把配分函数近似写为

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \simeq \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H} \quad (2)$$

其中 $\Delta\tau = \beta/L$ $\beta = 1/kT$

对于一定的量子体系经过适当的技术处

物理

理，就可把 d 维量子体系转换为 $(d+1)$ 维的经典体系。

二、量子蒙特卡罗的几种具体方法

量子蒙特卡罗的各种方法在理论上都是基于 Trotter 公式，但在具体处理上又不尽相同。现在应用较多有修正格林函数法、界线法、稳定量子蒙特卡罗法和映射量子蒙特卡罗法。另外还有热场法、折叠法和量子转移矩阵法。这些方法各有千秋，在不同情况下，处理不同的量子体系时各有独到之处。

1. 界线法

界线 (world line) 法是一种很简捷的算法，考虑到与哈密顿相关的各种物理守恒定律后计算速度会更快。用它模拟 100 个格点的量子体系也可很快算出结果。它是 J. E. Hirsch 等人^[6]1981 年提出，早期应用较多的一种方法。它较适于处理一维，尤其是一维无自旋的量子体系。

对于一维无自旋最近邻相互作用的量子体系， H 是它的哈密顿算符。把 β 等分 L 份 ($\Delta\tau = \beta/L$)，在每一虚时间间隔内插入完备态，这样配分函数可写为

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{i_1, \dots, i_L} \langle i_1 | e^{-\Delta\tau H} | i_L \rangle \times \langle i_L | e^{-\Delta\tau H} | i_{L-1} \rangle \cdots \langle i_2 | e^{-\Delta\tau H} | i_1 \rangle, \quad (3)$$

一般上式中的矩阵元不易算出，为此把哈密顿 H 分为

$$H = H_1 + H_2, \quad H_1 = \sum_{i \in \mathbb{N}} H_i, \\ H_2 = \sum_{i \in \mathbb{B}} H_i, \quad (4)$$

当 $\Delta\tau$ 较小时有

$$e^{-\Delta\tau H} \simeq e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} [1 + O(\Delta\tau^2)]. \quad (5)$$

在(3)式中再插入中间完备态有

$$Z = \sum_{i_1, \dots, i_{2L}} \langle i_1 | U_1 | i_{2L} \rangle \langle i_{2L} | U_2 | i_{2L-1} \rangle \times \langle i_{2L-1} | U_1 | i_{2L-2} \rangle \cdots \langle i_2 | U_2 | i_1 \rangle, \quad (6)$$

这里

$$U_i = e^{-\Delta_i H_i} \quad (i = 1, 2). \quad (7)$$

对于最近邻相互作用的体系,取周期性边界条件。在占有数表象中合适选取完备态,那么(6)式中的矩阵元只是一个仅牵涉两个最近邻格点的问题,用二次量子化理论很易求出。

图2是8个格点的晶格体系随时间演化的图示。在每一时间间隔内有一个算子 U_1 和一个算子 U_2 作用。阴影区相应于 H_1 或 H_2 起作用的区域,粗线是允许的费米子界线,这也是界线法名称的由来。经过以上处理只要计算出物理量在一个组态中的值就可以用蒙特卡罗方法计算出物理量的平均值。

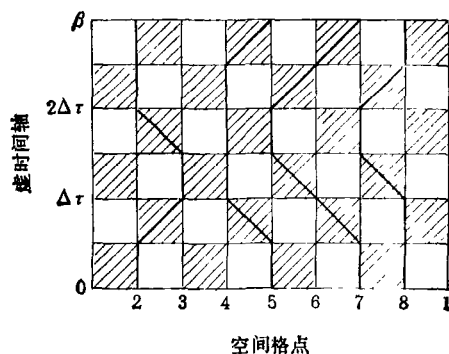


图 2

在画上斜线的正方形中费米子可以跳跃和相互作用,而在空白区不能

J. E. Hirsch 等人应用界线法研究了一维无自旋半满带的 Hubbard 模型,计算了体系的内能、比热、电荷结构因子和关联函数。他们发现在半满带时体系有形成电荷密度波(CDW)的趋势。姚凯伦、施勇¹⁾研究了其他填充带的情况,发现体系在非半满情况下没有形成电荷密度波的任何迹象。

2. 修正格林函数法

量子蒙特卡罗修正格林函数法是近来人们采用最多的方法。它的应用价值最大、取得的成果最为引人注目。在对它改进过程中又产生了许多新的算法。

1981年, R. Blankenbecler 等人²⁾用量子场论中的路径积分公式,经过繁琐的理论推

导引进了修正格林函数法。转换为 $(d+1)$ 维的经典体系中,只要有一个组态发生变化,就会引起格林函数的改变。若按常规方法,在计算中为了求变化后的格林函数,需要经过求多个矩阵的连乘。而用修正格林函数法可以由变化前的格林函数简便、精确地求出变化后的格林函数,从而大大节省了计算量。

修正格林函数法可以应用到多种物理模型的研究中,象玻色-费米耦合系统以及较复杂的 Hubbard 模型和 Kondo 模型等。并且这种方法既可以用于低维体系又可以很方便地用于高维体系。由格林函数的特性,还可以便利地进行诸如内能、磁化率、电子间的关联函数等多种物理量的计算。

3. 稳定量子蒙特卡罗法

在低温时 $\beta (=1/kT)$ 较大,相应地 L 就要取较大的值。由于统计误差使量子蒙特卡罗方法在低温时不稳定,无法触及到体系低温时的性质。而体系的基态和低温性质又是人们极为感兴趣的。为了解决这个问题, J. E. Hirsch³⁾基于修正格林函数法,把每个虚时间间隔再等分为 L_0 分,得出稳定量子蒙特卡罗法。它较适于研究费米晶格体系,尤其是 Hubbard 和类似 Hubbard 体系。用它研究极低温度下的量子体系,得到的结果仍十分可靠。但这种方法是以极大地扩大计算量为前提的。用它研究二维 8×8 的 Hubbard 模型,在超级计算机上计算一组数据也需要几个小时;这在微机上根本无法计算。

4. 映射量子蒙特卡罗法

温度较低时,尤其是在非半满情况下,由于舍入误差的影响,在实际模拟中常碰到令人棘手的问题——玻尔兹曼权重因子出现负号。H. de Raedt 等人⁴⁾改进、发展了映射(projector)量子蒙特卡罗法。它是基于这样的特性:一个指数算符 $e^{-\theta H}$ 可以把一个尝试波函数 $|\phi_T\rangle$ 映射(投影)到一个能量最低状态的波函数,而该函数可以不与尝试波函数正交。

1) 姚凯伦,施勇,1987年全国超导会议论文集。

映射量子蒙特卡罗法一个重要的特点是，用它可以非常精确地计算费米体系基态的能量。并且，这种方法在不影响精度的情况下无需采用进一步的近似就可以处理玻耳兹曼权重因子出现负号的问题。

三、量子蒙特卡罗方法与高温超导电性机理的研究

前几年高温超导现象被发现以后，人们提出很多复杂的超导理论，众说纷纭莫衷一是。几年来量子蒙特卡罗方法在高温超导电性机理的研究起了一定的作用。用它得出的结果一方面指出了某些理论的缺陷和不足，同时对某些理论给予很有说明力的支持，对某些推测予以肯定或否定，从而推动了超导电性机理的研究。

1987年，著名物理学家 P. W. Anderson 就指出二维 Hubbard 模型对于高温超导电性机理的重要性。对他的说法，尽管有些问题尚有争论，但在 Hubbard 模型非常适于解释高温超导体的电子结构和磁学性质这一点上，人们都有相同的看法。Hubbard 模型是描述窄带固体最简单的紧束缚模型，但在一般情况下它是不能被严格解出的。以往的多种近似方法都可解释模型的某些物理性质，可又往往给出自相矛盾的结果。量子蒙特卡罗方法在研究 Hubbard 模型中取得了很大的成功，获得了令人满意的结果。

J. E. Hirsch 引入辅助伊辛自旋后得到分立的 Hubbard-Stratonoyich 变换。这极大地推动了 Hubbard 和类似 Hubbard 体系的量子蒙特卡罗研究。J. E. Hirsch 研究了二维 Hubbard 模型的超导电性问题，他认为二维单能带的 Hubbard 体系不会发生向超导态的转变。S. R. White 等人^[10]引入一种新的变换，得出一种特别适于研究二维低温时的 Hubbard 体系的新算法。他们模拟了多电子的 Hubbard 体系。计算结果显示 d-波对磁化率 Pd 随着温度的降低单调地增加，如图 3 所示。由此他们得出与 J. E. Hirsch 相异的看法：二维 Hu-

bbard 体系在低温时有向超导态转变的可能。Raimundo R. dos Santos 研究了最近邻、次最近邻电子跳跃的二维 Hubbard 模型，并把他们的量子蒙特卡罗结果与超导体中的 CuO₂ 平面联系起来，他们也认为单能带二维 Hubbard 体系，在一定的能带结构下有可能存在由正常态到超导态的相变。

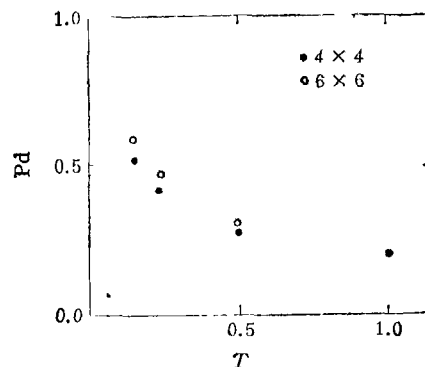


图 3 磁化率随温度降低持续增加

人们推测当金属或合金中有负 U 杂质存在时，由于电子轨道的杂化和隧道效应可能会使金属或合金的超导转变温度 T_c 有所提高，可是人们无法从理论证实。近来甚至有人认为在钙钛矿结构的超导体中，负 U 杂质是引起超导的原因。D. J. Scalapino 等人^[11]应用量子蒙特卡罗方法研究了有负 U 杂质的局域激子模型，他们得出结论：当杂质空位和双占据态接近简并时，以及当电子和激子的耦合强度取适当值时， T_c 都会有实质性的提高。

四、量子蒙特卡罗方法存在的问题及其发展前景

量子蒙特卡罗方法十多年来取得了巨大的进展，用它处理许多量子体系也是极为成功的，可以说量子蒙特卡罗方法开辟了一条研究量子体系的新途径。但是，除蒙特卡罗方法本身计算量大、误差的概率性外，这里仍存在一些問題。玻色体系的蒙特卡罗模拟比较容易，算法已很成熟，对于某些费米体系也已有一些成功

(下转第 543 页)