

21. 量子スピン系の Resonating Valence Bond の理論

小口武彦・北谷英嗣 (長岡技科大)

我々は Anderson¹⁾ が提案した Resonating Valence Bond (RVB) 状態に対しその構成要素の singlet ボンドを、必ずしも最隣接スピン対に限らないという拡張を行ない、スピン 1/2 の有限系の反強磁性 Heisenberg モデルの厳密な解を求めることができた。

ハミルトニアンは結晶型によらずに次のように書ける。

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} 2 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) = \sum_{\langle i,j \rangle} (P_{i,j} - \frac{1}{2}). \quad (1)$$

和は最隣接格子点の対について行ない、 \mathbf{S}_i は i 番目の格子点のスピン演算子、 $P_{i,j}$ は i と j のスピンの交換演算子である。交換積分は 1 としてある。 N 個のスピンから成る系の RVB 状態の 1 つの波動関数は、 a, b, \dots をそれぞれの格子点上のスピン演算子とすると

$$\phi_i = [a, b][c, d][e, f] \dots, \quad (2)$$

$$[a, b] \equiv (\alpha_a \beta_b - \beta_a \alpha_b) / \sqrt{2}, \quad (3)$$

という形で表わされる。(2) で singlet 関数の総数は $N/2$ 個である。(2) に \mathcal{H} を作用させると、スピンは交換するが、 $N/2$ 個の singlet ボンドの積という形は不変である。(2) の形をもつ異なった波動関数の総数 D_N は

$$D_N = \binom{N}{2} \binom{N-2}{2} \dots \binom{2}{2} / (N/2)! \approx (N/e)^{N/2}. \quad (4)$$

この D_N 個の波動関数は RVB 状態の部分空間を張る。しかし、それらは非直交であり over complete である。このことが RVB の扱いを複雑にする。

まず、重なり積分 $\langle \phi_i | \phi_j \rangle$ ($i, j=1, 2, \dots, D_N$) の行列を計算する。それを対角化すると、次の直交波動関数 $\tilde{\phi}_i$ が得られる。

$$\begin{matrix} n_0 \\ \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\phi}_1 \\ \vdots \\ \tilde{\phi}_{n_0} \end{array} \right. \\ m \\ \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\phi}_{n_0+1} \\ \vdots \\ \tilde{\phi}_{D_N} \end{array} \right. \end{matrix} \begin{bmatrix} \tilde{\phi}_1 & \dots & \tilde{\phi}_{n_0} & \tilde{\phi}_{n_0+1} & \dots & \tilde{\phi}_{D_N} \\ a_1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & a_{n_0} & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (m = D_N - n_0) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} |\tilde{\phi}_i\rangle = & \tilde{V}_{1,i} |\phi_1\rangle + \cdots + \tilde{V}_{n_0,i} |\phi_{n_0}\rangle + \tilde{V}_{n_0+1,i} |\phi_{n_0+1}\rangle + \cdots \\ & \cdots + \tilde{V}_{D_N,i} |\phi_{D_N}\rangle, \quad (i=1, 2, \dots, D_N). \end{aligned} \quad (6)$$

(5) の対角要素 a_1, \dots, a_{n_0} は必ずしも 1 ではない。つまり $|\tilde{\phi}_1\rangle, \dots, |\tilde{\phi}_{n_0}\rangle$ は規格化されていない。これに対し $|\tilde{\phi}_{n_0+1}\rangle, \dots, |\tilde{\phi}_{D_N}\rangle$ は 0 であるから D_N 個の $|\phi\rangle$ に対し $m \equiv (D_N - n_0)$ 個の関係式を得る。これにより独立な $|\phi\rangle$ の数は n_0 であることがわかる。これらを基底関数と呼ぶことにする。基底関数の選び方は多数あるが、今後は $|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_{n_0}\rangle$ を基底関数に選ぶことにする。すると、残りの $|\phi_{n_0+1}\rangle, \dots, |\phi_{D_N}\rangle$ は基底関数の線形結合で表わされる。

上に述べた方法は正当的であるが、必ずしも簡単ではない。基底関数を決めるのは Pauling²⁾ の方法が便利である。それは N 個のスピンを円周上に並べ任意の 2 個ずつを線で結ぶ。線は singlet ボンドを表わす。これらの線が交差しない図形が基底関数である。第 1 図に $N=6, 8, 10, \dots$ の場合を示す。こうして規格直交関数 $|\Phi_i\rangle$ が n_0 個の基底関数の線形結合で表わされる

$$|\Phi_i\rangle = \sum_{j=1}^{n_0} V_{j,i} |\phi_j\rangle. \quad (7)$$

\mathcal{H} を (7) に作用させると

$$\mathcal{H} |\Phi_i\rangle = \sum_{j,l}^{n_0} |\Phi_l\rangle \langle \Phi_l | V_{j,i} \mathcal{H} | \phi_j \rangle = \sum_{j,k,l}^{n_0} V_{l,k}^t \mathcal{H}_{k,j} V_{j,i} |\Phi_l\rangle \quad (8)$$

$$V_{l,k}^t = V_{k,l}, \quad \mathcal{H}_{k,j} \equiv \langle \phi_k | \mathcal{H} | \phi_j \rangle. \quad (9)$$

したがって永年方程式は

$$|V^t \mathcal{H} V - E I| = 0 \quad (10)$$

となる。1 は単位行列である。有限系に対し (10) を解いて、その固有値を、他の方法で求められている厳密解と比べると完全に一致する。つまり R V B 状態は Heisenberg モデルの厳密解である。

次に基底関数のスピン多重度を調べよう。全スピンの 2 乗 $(S_{tot})^2 \equiv (\sum_{i=1}^N S_i)^2$ は \mathcal{H} と交換することはよく知られている。事実 $(S_{tot})^2$ を基底関数の 1 つに演算すると

$$(S_{tot})^2 \phi_i = 0, \quad (11)$$

が得られるので、R V B 状態は $S_{tot} = 0$ であり、基底関数 n_0 は第 2 図で示した分岐図で $N, S_{tot} = 0$ における独立な関数 $N! / \{(N/2)!(N/2+1)!\}$ に等しい。このことは結晶型には依存しない。

基底の 1 つの singlet を triplet に変えたもの、即ち

$$\psi_j = \{a, b\} [c, d] [e, f] \dots, \quad \{a, b\} = (\alpha_a \beta_b + \beta_a \alpha_b) / \sqrt{2} \quad (12)$$

これに $(S_{tot})^2$ を作用させると

$$S_{tot}^2 \psi_j = 2\psi_j \quad (13)$$

がえられる。つまり (12) のタイプの基底関数は $S_{tot} = 1$ に属する。この場合の独立な基底関数の数は第 2 図の N , $S_{tot} = 1$ に対する数と一致して、それを用いて得られた解は、他の方法で得られたものと完全に一致する。しかし、(2) で 2 個の singlet を 2 個の triplet で置き換えたものは容易に予想されるように $S_{tot} = 2$ と 0 が混ざる。

我々の方法は互いに最隣接でないスピン間の singlet ボンドをも考慮することが特徴であるが、そのようなボンドが基底状態に含まれる割合を調べるために、平均長 AL を定義する。いま RVB の基底状態 $|\Psi_{g.s.}\rangle$ を基底関数 $|\phi_i\rangle$ の線形結合

$$|\Psi_{g.s.}\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle \quad (14)$$

と書くとき、基底関数 $|\phi_i\rangle$ の AL は、例えば 1 次元格子の $N = 6$ の場合は、第 1 図の右側の基底関数に例をとると 2 番と 3 番及び 5 番と 6 番の距離はともに 1 であるのに対し、1 番と 4 番の距離は 3 であるから、この図形の AL を $l = (3 + 1 + 1) / 3 = 5/3$ と定義する。 l はもちろん結晶型に依存する。したがって (14) の AL は

$$AL = \frac{\sum_i \sum_j c_i^* c_j \langle \phi_i | \phi_j \rangle (l_i + l_j)}{2} \quad (15)$$

このようにして計算された 1 次元格子の AL を最隣接相互作用のみの場合 (第 3 図) と infinite range 相互作用の場合 (第 4 図) を示す。前者の場合は、 $N \rightarrow \infty$ に対し $AL / N \rightarrow 0$ ($AL \rightarrow N^\xi$, $\xi < 1$) となるが、後者の場合は $AL / N \rightarrow 0.25$ になる。くわしい報告は文献 3 を参照してほしい。

我々の研究と全く独立に千葉大のグループの研究⁴⁾ が 10 月の広島における日本物理学会で報告されている。

文献

- 1) P.W. Anderson: Mater. Res. Bull. 8 (1973) 153.
- 2) L. Pauling: J. Chem. Phys. 1 (1933) 280.
- 3) T. Oguchi and H. Kitatani: Submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
- 4) J. Hamada, J. Kane, S. Nakagawa and Y. Natsume: 物理学会予稿集 4p-D5-5 3 (1988) 379.

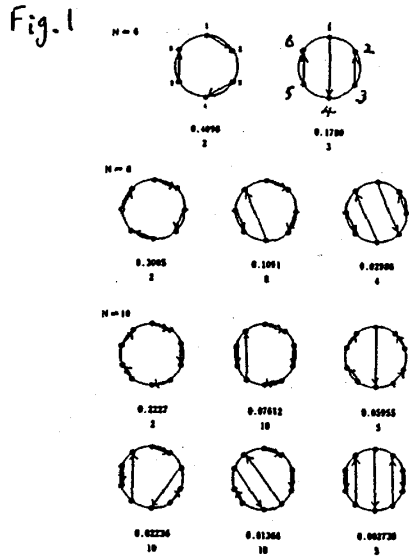


Fig. 2

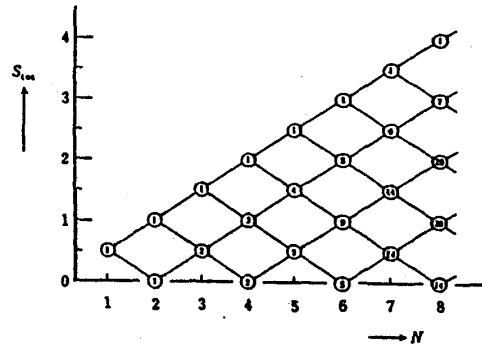


Fig. 3

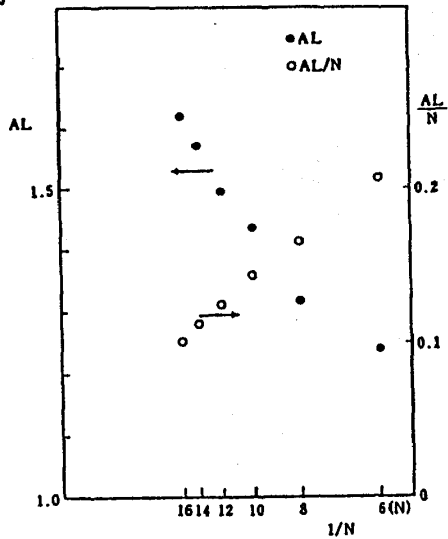
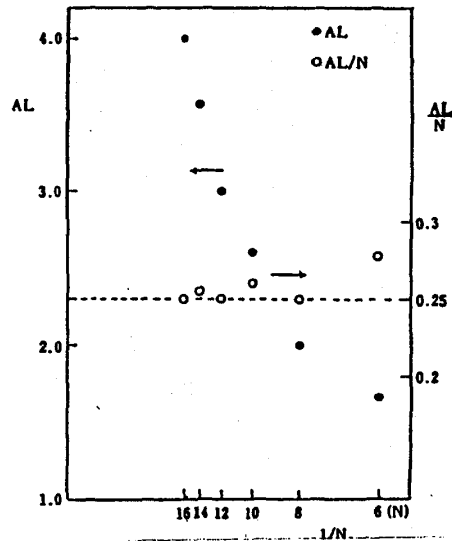


Fig. 4



才1图

The bases of a linear chain lattice for $N=6, 8$ and 10 . Numeral under each graph denotes the value of the coefficient of a linear combination in the eigenfunction of the ground state. Integers denotes the number of equivalent bases obtained by symmetry operations.

才2图

Branching rule diagram. Numerals represent the number of independent functions for N and S_{tot} .

才3图

Average length AL and AL/N versus $1/N$ for $N=6, 8, \dots, 16$ of a linear chain lattice with nearest neighbor interactions.

才4图

Same as Fig. 3 except that they are infinite range interactions.