千葉大学大学院理学研究科物理学専攻

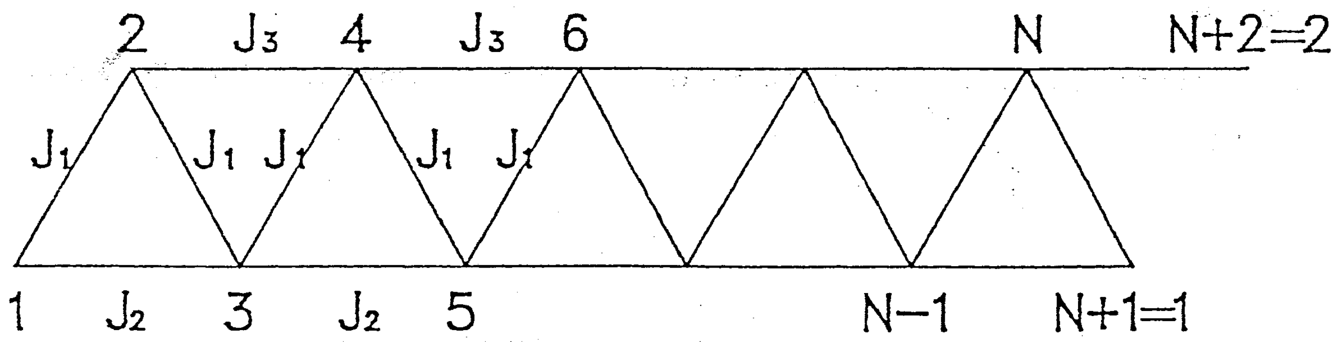

図 1

3. 正方格子反強磁性量子Heisenberg模型の基底状態
—— 有限系厳密解とRVB描像変分解 ——

中　川　真　一

1サイトあたり1電子を持つ Hubbard 模型は電子相関を大きくした極限でスピン 1/2 の反強磁性 Heisenberg 模型になる。正方格子系については有限系では厳密計算[1]やモンテカルロ[2,3]による計算などがなされているが、無限系の厳密解は、未だ知られていない。こうした状況において、我々は、この反強磁性系の基底状態をサイト数 10,16,18,20,26 の有限系について、行列の対角化を用いて厳密解を求め、基底エネルギー、スピン間相関、staggered磁化、Neel確率を計算した。

また、Anderson によって提案された Resonating・Valence・Bond（ＲＶＢ）状態は[4,5]、本来、三角格子系についてのものであったが、最近こうしたＲＶＢ状態が、高温超伝導と関係があるという彼の指摘によって新たな重要性を帯びてきた。これに対し、我々は、空間的に遠くにある格子点間のＲＶＢも取り入れた拡張型ＲＶＢ描像[6]を導入して、この問題に取り組んできた。その一環として Neel 状態や古典スピン系に比べて直観的には分かりにくい状態であるＲＶＢ状態に対して、描像を明らかにした変分関数を導入した[7]。

我々の変分関数はＲＶＢのあらゆる組合せについて積をとり、可能なパターン配置で和をとってある。その際、パラメータとしては図１（例としてＮ＝26）のように幾何学的種類分けによる重み x_0～x_3を用いている。求まった基底エネルギー（１スピン当りで、単位は交換相互作用Ｊ）を図２（例としてＮ＝26）

に示す。厳密解と変分解との一致は極めてよい。また、第一隣接のＲＶＢのみを取り入れた計算は全く不充分であることがわかる。さらに、staggered 磁化、スピン間相関についても求めた。これらの量においても厳密解と変分解との一致は極めて良い。

参考文献

1) M.Inoue et al., J.Phys.Soc.Jpn. 57, (1988) 3733.

2) S.Liang, B.Doucot and P.W.Anderson, Phys.Rev.Lett. 61, (1988) 365.

3) T.Barnes and E.S.Swanson, Phys.Rev.B37, (1988) 9405.

4) P.W.Anderson, Mat.Res.Bull. 8, (1973) 153.

5) P.Fazekas and P.W.Anderson, Philos. Mag. 30, (1974) 423.

6) T.Hamada, J.Kane, S.Nakagawa and Y.Natsume, J.Phys.Soc.Jpn. 57 (1988) 1891.

7) S.Nakagawa, T.Hamada, J.Kane and Y.Natsume, to be submitted.

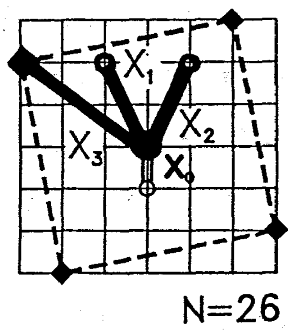

図1

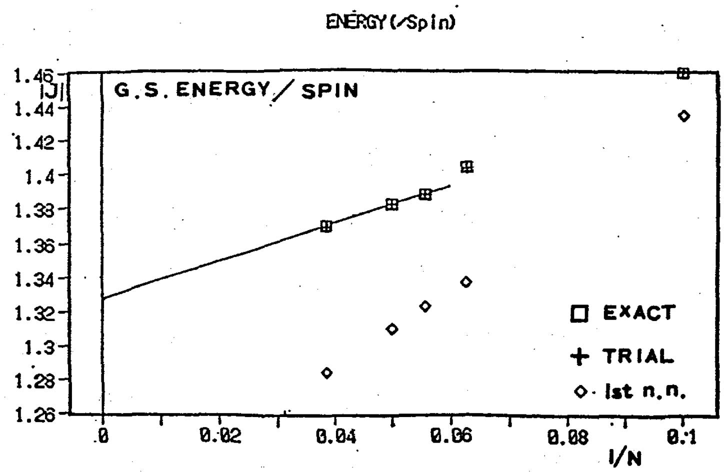

図2