1次元$S=1/2\ XXZ$モデルにおける異方性と Bond Alternation

東工大・理　岡 本 清 美

Bond Alternation のある1次元 $S=1/2\ XXZ$モデル

$$H = J\sum_j [1+(-1)^j\delta](S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z), \quad J>0, \tag{1}$$

の基底状態の相図を調べた。[1)]　$\delta\ (0\le\delta\le 1)$ は bond alternation のパラメタである。また，Δは異方性のパラメタで，反強磁性 Ising　モデル（$\Delta=\infty$），等方的反強磁性 Heisenberg モデル（$\Delta=1$），XYモデル（$\Delta=0$），等方的反強磁性 Heisenberg モデル（$\Delta=-1$），および強磁性 Ising モデル（$\Delta=-\infty$）を連続的にカバーする。ここでは $-1<\Delta\le 0$ の強磁性的な場合に焦点を絞った。$\delta=0$ では基底状態は励起スペクトルにギャップがなくスピン相関距離ξが発散した状態（spin fluid [SF] 状態と呼ぼう）になっている。また，$\Delta=0$ のXYモデルでは$\delta>0$である限り基底状態は強いボンドのところに一重項対が実効的に固定された状態（Effective Singlet [ES] 状態）であることがわかっている。ES状態では励起ギャップがありξは有限である。

このハミルトニアンはボソン場を用いて

$$H = \int dx[A(\nabla\theta)^2 + CP^2 - B\cos\theta + D\cos 2\theta], \tag{2}$$

と表現できる。ただし，　$[\theta(x), P(x')] = i\delta(x-x')$，係数$A, C$ はΔのなめらかな関数であり，$B\propto\delta$，$D\propto\Delta$である。Double sine-Gordon ハミルトニアン(2)に対して繰り込み群および変分法を適用し，係数Bがゼロに繰り込まれるかどうかで基底状態が SF 状態か ES 状態かが判定できる。

その結果，図のような基底状態の相図を得た。ここでは相図を$-\infty<\Delta<\infty$に対して描いた。残念ながら$\Delta<-1/\sqrt{2}$ の相境界線の傾きは$\Delta=-1/\sqrt{2}$ 付近においても求められなかったが，その理由は繰り込み群の計算で高波数部分を繰り込むときに“slicing procedure” に依存する定数が現れるためである。また，(2)がδの小さいところしか使えないことと繰り込み群の適用限界から，ES-SF境界線が（Δ，δ）＝（-1，1）に達するかどうかはわからない。しかし物理的状況からは図のような状況が極めて自然であると考えられる。なお，この相図は Ashkin-Teller モデルとの関連で Kohmoto, den Nijs and Kadanoff[2)] が求めたものと同じである。図で$\delta=0$は常に SF 状態である。$\Delta>-1/\sqrt{2}$においては ES-SF 転移は2次相転移，$\Delta<-1/\sqrt{2}$においては KT 転移になっている。前者の転移では$\delta\to 0$のとき，励起ギャップ ε_gと相関距離ξはそれぞれ $\varepsilon_g\sim\delta^b$，$\xi\sim\delta^{-\nu}$ のように振舞い，臨界指数は$\eta\equiv 2/[1+(2/\pi)\sin^{-1}\Delta]$を用いて　$b=\nu=2/(4-\eta)$と表される。

以上の解析的予想の当否を調べるため，スピン数Nが20までの系でハミルトニアンを数値的に厳密に対角化し，有限サイズスケーリングを用いて数値データを解析した。数値的に求めた物理量は数種類あるが，最もスケーリングに乗りやすかったのは励起ギャップ ε_g である。Δを固定したとき，ε_g に対する有限サイズスケーリングの式は

$$\varepsilon_g(N,\delta) \sim N^{-1}g(N/\xi), \tag{3}$$

と書ける。$\Delta > 1/\sqrt{2}$ の場合は $\xi \sim \delta^{-\nu}$ を考慮して$N\varepsilon_g(N,\delta)$対 $N\delta^\nu$がユニバーサルになるようにνを決めればよい。この方法あるいはこれを少し変形した方法から求めたνの値は解析的予想値と極めてよく一致した。

一方，$\Delta < -1/\sqrt{2}$ではδの臨界値δ_cが最初からわかっているわけではないので，上の方法は使いにくい，(3)によると$N\varepsilon_g(N,\delta)$対$\log N$ はユニバーサルではないが，各曲線を $\log\xi(\delta)$だけずらせばユニバーサルになる。したがって，基準点δ_0に対するξの変化 $\log[\xi(\delta)/\xi(\delta_0)]$ が数値的に求められる。この $\log[\xi(\delta)/\xi(\delta_0)]$ は生の数値データと有限サイズスケーリング仮定(3)だけから求められたものであり，$\xi(\delta)$の関数形には何も仮定はしていない。こうして数値的に求められた$\xi(\delta)$は KT 型の変化 $\xi(\delta) \sim \exp(a/\sqrt{\delta-\delta_c})$ を示し，この式にフィットさせることにより臨界値δ_cが求められる。

数値的に決定された相図（$-1<\Delta<0$）は解析的予想を強く支持している。特に ES-SF 境界が$(\Delta,\delta)=(-1/\sqrt{2},0)$ から立ち上がり，(-1, 1) に達することには疑問の余地がない。

参考文献

1) S. Yoshida and K. Okamoto: J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1989) 4367.
2) M. Kohnoto, M. den Nijs and L. P. Kadanoff: Phys. Rev. **B24** (1981) 5229.