磁場中のハルデン磁性体

東京大学物性研究所 高橋實

要旨。磁場中のハルデン磁性体はギャップのない状態になり、共形場理論や朝永 - Luttinger 液体理論が適用できる。また最近ＮＥＮＰの重水素化された単結晶が中性子散乱に使われるようになり、動的相関関数 $S(Q,\omega)$ を直接測定できるようになった。厳密対角化の方法を用いることによって、$S(Q,\omega)$ を $S=1$ ハイゼンベルグ鎖について直接計算をし、かつ実験との比較を行なう。

$S=1$ ハイゼンベルグ反強磁性鎖は二点相関関数が指数関数的に減衰するが、磁化した状態では代数的に減衰する。この様子を有限対角化の方法で調べた。我々の求めた磁化曲線および微分帯磁率 [1-5] は実際の有機 Haldane 磁性体であるＮＥＮＰやＴＭＮＩＮの強磁場での実験と大変良く一致した [6]。また素励起については量子モンテカルロ法による計算が行なわれていた [7,8]。考察するハミルトニアンは次のようなものである。

$$\mathcal{H}=\sum_{i=1}^{N}\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_{i+1}-\beta(\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_{i+1})^2+DS_i^zS_{i+1}^z,\quad \mathbf{S}_{N+1}\equiv\mathbf{S}_i. \tag{1}$$

最近重水素化したＮＥＮＰの試料による中性子散乱実験が発表され [9]、量子モンテカルロ法により求めた素励起スペクトルと良く一致することが示された。実験との比較をより精密にするため、異方性のある場合の計算が必要になり、前年度は１８個の対角化を行なった [10]。$\beta=0$ とし、異方性パラメーター $D=0.2$ とした。また Haldane 磁性体に対しては量子モンテカルロ法も有力な方法で異方性のある場合での計算を行なった。異方性のある系では次の二つの動的構造因子が重要である。

$$S_{\parallel}(Q,\omega)=\sum_n|<n|S_Q^z|0>|^2\delta(\omega-(E_n-E_0)/\hbar), \tag{2}$$

$$S_{\perp}(Q,\omega)=\sum_n|<n|S_Q^-|0>|^2\delta(\omega-(E_n-E_0)/\hbar). \tag{3}$$

ここで $|0>$ と E_0 はそれぞれ基底状態ケットベクトルとその固有値である。$<n|$ はモーメンタム $Q=2\pi\times\text{integer}/N$ をもつ固有状態のブラベクトルである。 ここで我々はつぎのように置く。

$$S_Q^z\equiv N^{-1/2}\sum_l S_l^z\exp(-iQl),\quad S_Q^{\pm}\equiv N^{-1/2}\sum_l(S_l^x\pm iS_l^y)\exp(-iQl). \tag{4}$$

$S_z=0$ のシングレットは $S_{\parallel}(Q,\omega)$ の中に、$S_z=\pm1$ のダブレットは $S_{\perp}(Q,\omega)$ の中に現われる。最近の重水素化されたＮＥＮＰの動的構造因子は $|Q|/\pi<0.3$ を除いたほとんどの領域で観測できるようになった。$S=1$ の一次元鎖の場合には $S_{\parallel}(Q,\omega)$ の重みのかなりの部分が $\omega=(E_{Q,S_z=0}-E_0)/\hbar$ のピークにある。ここで $E_{Q,S_z=0}$ はモーメンタム Q で total $S_z=0$ の最低エネルギーである。前年度に行なった計算の結果、最低

エネルギー状態はサムルールで予想される散乱強度をほぼ尽くしていて、殆どの領域で９０％を越えていることが判明した。

本年度我々はまずなるべく大きな系でハミルトニアン (1) を Lanczos 法を使って対角化する事を考える。このハミルトニアンは 3^N の次元を持っているが、z 方向の全角運動量で部分空間に分けられる。また並進対称性を持っているので、運動量を使ってさらに小さな部分空間に分けられる。この時得られるハミルトニアンは一般にエルミート行列となり、固有ベクトルは複素数を要素とするベクトルになる。ところがこのハミルトニアンは反転対称性も持っている。これを考慮すれば実対称行列に変換できて、固有ベクトルも実数を要素とするベクトルで表すことが出来る。このために必要な計算量や記憶容量もほぼ半分になる。今まで $N=18$ の系が対角化されていたが、[10] この方法により $N=20$ の系もＳ－３８００で行なうことが可能になった。このときベクトルの長さは約 18.9×10^6 となる。

また Lanczos 法を使って $T=0$ に於ける動的相関関数 $S(Q,\omega)$ を計算する方法が Gagliano 達によって与えられている [11]。この方法を使えば、最低エネルギー状態の散乱強度ばかりでなく、高い励起状態による散乱強度も一度に計算することができる。

最後にこの研究会のテーマに関係する事項で何回も質問を受けた事についてここで答えて置きます。熱力学ベーテ仮説で良く使われる Takahashi-Suzuki の string 仮説はＸＸＺ（ＸＹ like) について波動関数の規格化条件から導出できることが以下の論文に示されています。 K. Hida, Phys. Lett. **84A**,338 (1981). M. Fowler and X. Zotos, Phys. Rev. B **24**,2634 (1981). 但しサイト数が無限大で down-spin の数が有限という条件はつきます。基底状態での第二近接相関関数の解析的表現は $S=1/2$ ＸＸＸ反強磁性体鎖について知られています。 M. Takahashi, J. Phys. C **10** 1289 (1977).

$$< S_i^z S_{i+2}^z >= \frac{1}{12}(1-16\ln 2+9\zeta(3)) = 0.06067977.$$

これにたいして最近接相関は Hulthen により

$$< S_i^z S_{i+1}^z >= \frac{1}{12}(1-4\ln 2) = -0.14771573.$$

第三以上についてはこの種の公式はまだないようです。

References

1. M. Takahashi and T. Sakai, Magnetization Curve and Correlation Function of Haldane-Gap Antiferromagnet in Strong Magnetic Field: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991)760-763.
2. T. Sakai and M. Takahashi, S=1 Antiferromagnetic Heisenberg Chain in a Magnetic Field: Phys. Rev. B **43** (1991) 13383-13393.
3. T. Sakai and M. Takahashi, Finite-Size Corrections and Spin Correlations of Magnetized S=1 Antiferromagnetic Heisenberg Chain: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991) 3615-3619.
4. T. Sakai and M. Takahashi, S=1 Antiferromagnetic Heisenberg Chain with an Axial-Symmetry-Breaking Anisotropy: Phys. Rev. B **44** (1991) 10385-10388.
5. T. Sakai and M. Takahashi, Haldane Antiferromagnet in a Magnetic Field: in 'Computational approaches in Condensed Matter Physics', edited by S. Miyashita, M. Imada and H. Takayama, (Springer 1992) 171-172.
6. T. Takeuchi, H. Hori, T. Yosida, A. Yamagishi, K. Katsumata, J.P. Renard, V. Gadet, M. Verdaguer and M. Date, Magnetization Process of Haldane Materials TMNIN and NINAZ: J. Phys.Soc. Jpn. **61**,3262(1992)
7. M. Takahashi, Monte Carlo Calculation of Elementary Excitation of Spin Chains: Phys. Rev. Lett. **62**,2313(1989)
8. M. Takahashi, Numerical Calculations of $S = 1$ Heisenberg Antiferromagnetic Chain: in 'Computational approaches in Condensed Matter Physics', edited by S. Miyashita, M. Imada and H. Takayama, (Springer 1992) 152-156.
9. S. Ma, C. Broholm, D.H. Reich B.J. Sternlieb and R.W. Erwin ,Dominance of long-lived excitations in the antiferromagnetic spin-1 chain NENP: Phys. Rev. Lett.**69**, 3571(1992).
10. M. Takahashi, Elementary excitations of an anisotropic spin-1 chain: Phys. Rev. B**48**,311 (1993).
11. E.R. Gagliano and C.A. Balseiro, Dynamical roperties of quantum many-body systems at zero temperature: Phys. Rev. Lett. **59**, 2999 (1987).

図1。$N=20,\quad \beta=0,\quad D=0$ における $S(Q,\omega)$ の励起の位置とその散乱強度。数字は全散乱強度の中での割合を示す。