

$S = 1/2$ ランダム強磁性 - 反強磁性ハイゼンベルグ鎖の基底状態¹

神戸大学自然科学研究科 引原 俊哉²
 京都大学基礎物理学研究所 古崎 昭、M.Sigrist³

1 Introduction

近年、1次元量子系におけるランダムネスの効果が注目を集めている。それらの系の低 energy 状態では、系の低次元性からくる量子効果とランダムネスの効果が絡み合い、一様な量子系でも、ランダムネスをもつ古典系でも現出しない、複雑で豊かな物性が顔を出す。

我々が今回扱った $S = 1/2$ random Heisenberg chain は、Hamiltonian

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} J_i \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i+1} \quad (\vec{s}_i \text{ は } S = 1/2 \text{ spin operator}) \quad (1)$$

で与えられる。交換相互作用定数 J_i は確率分布 $P(J_i)$ に従って random な値をとる。

Hamiltonian (1) の理論的解析において最も有効な方法の一つは、実空間繰り込み群法 (RSRG) である [1]。交換相互作用が反強磁性的な範囲で random な値をとる場合 (random AF case) については、その RG 方程式が Fisher によって解析的に解かれており、その基底状態は、“random singlet” 相と呼ばれる、各 spin が任意に離れた partner と singlet を組んだ状態で表される [2]。Fisher は、この “random singlet” 相の描像から、random AF chain の基底状態では、staggered 相関関数の random 平均値 $\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ が r^{-2} でべき的に減衰することを示している。

他方、相互作用が強磁性、反強磁性両方を含めて random な値をとる場合 (random FM-AF case) についても、最近の研究からその熱力学的性質の定性的理解が進んできている [3, 4]。しかし、その低 energy 状態の性質はあまりよくわかっていないのが現状である。特に基底状態での spin 相関の振る舞いについてはほとんど未知の状態であり、系が長距離秩序 (LRO) をもつか否かは興味ある open problem として残されている。今回我々は、Hamiltonian (1) の基底状態における spin 相関関数を、これまでの RSRG の方法を拡張した algorithm を用いて数値的に計算した。以下、次節でその拡張について説明した後、第3節に得られた結果を示す。

2 RSRG

RSRG は最初、random AF chain の低 energy 状態を解析する方法として、Ma、Dasgupta、Hu により導入された [1]。ここでは、random FM-AF case にも適用できるように一般化された algorithm [3] について説明した後、我々の施した拡張について述べる。

RSRG の方法は簡単に言うと、「最も強い相互作用で結ばれた 2 spin を、その bond Hamiltonian の基底 multiplet である 1 つの effective spin (または singlet state) に合成する」操作からなる。

¹この報告の内容は preprint にまとめてある。cond-mat/9905352; submitted to Phys.Rev.B

²E-mail:hikihara@phys03.phys.sci.kobe-u.ac.jp

³E-mail: furusaki@yukawa.kyoto-u.ac.jp, sigrist@yukawa.kyoto-u.ac.jp

ここで、bond の強さは、その bond Hamiltonian の energy gap で定義する。この操作を繰り返すことで、random AF case では系の各所で次々と singlet pair が形成され、低 energy 固定点、すなわち系の基底状態では、“random singlet” 状態が実現する [2]。また、random FM-AF case では強磁性 bond の繰り込みにより effective spin の大きさが成長し、固定点付近では、系は大きな effective spin が並んだ状態で記述される [3]。algorithm をまとめると、以下ようになる。

- (i) 最も energy gap の大きい bond に着目し、その両側の effective spin を合成する。
- (ii) 合成 spin の状態のうち、基底 multiplet のみを残す。すなわち、2つの effective spin を1つの effective spin に freeze する。また、ここで基底 multiplet の波動関数を用いて、この effective spin に属する元々の $S = 1/2$ spin 間の相関関数を計算する。
- (iii) 合成された effective spin の両側の bond の energy gap を更新する。
- (iv) (i) に戻る。

このように、これまでの RSRG では、着目した bond Hamiltonian の基底 multiplet のみを残し、全ての励起 multiplet を捨ててしまう。これは、着目した bond Hamiltonian の energy gap が両隣より十分大きい場合にのみ妥当な操作である。しかし、この条件はしばしば成り立たず、そのような step では非常に近似の悪い繰り込み操作を行うことになる。このため、上記の algorithm で計算した相関関数の計算精度は非常に悪い(次節の図 1 参照)。そこで、我々は「計算機のメモリの許す限り、多くの低励起 multiplet を keep する」という方針で、algorithm を拡張する。具体的には、bond Hamiltonian の固有状態のうち、低 energy 側から最大 m 個の状態を keep する。そして、それらを base とした block state で各 block を表し、その block に対してこれまでと同様の繰り込み操作を行う。当然この方法の計算精度は、keep する状態の数 m に依存するため、データ解析に際しては、 m を増やしたときのデータの収束を注視する必要がある。次節に示すように、この拡張 RSRG の algorithm は非常に高い計算精度を実現している。

3 Results

我々は前節で述べた拡張 RSRG の方法を用いて、random AF、random FM-AF 両 case における、モデル(1)の基底状態相関関数を数値的に計算した。ここで、 $P(J_i)$ はそれぞれ box type

$$\text{random AF case} \quad P(J_i) = \begin{cases} \frac{1}{J_0} & (0 \leq J_i \leq J_0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2)$$

$$\text{random FM - AF case} \quad P(J_i) = \begin{cases} \frac{1}{2J_0} & (-J_0 \leq J_i \leq J_0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3)$$

としている (J_0 は energy unit)。計算は 1000 site の open chain に対して行い、random 平均は約 1500 sample chain についてとっている。また、計算結果の正しさを確かめるために、これま

での RSRG、密度行列繰り込み群法 (DMRG) を用いた計算を、それぞれ 100000、100 site open chain に対して行っている。我々は、以上の方法で計算した、“staggered” 相関関数

$$C(|i-j|) = \eta_{ij} \langle \bar{s}_i \cdot \bar{s}_j \rangle \quad \eta_{ij} = \prod_{k=i}^{j-1} \text{sgn}(-J_k) \quad (4)$$

の random 平均値 $\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ 、すなわち、系の mean correlation の振る舞いを解析した。

まず random AF case についての結果を図 1(a) に示す。拡張 RSRG のデータは、 $m = 30$ までで十分収束している。また、これまでの RSRG が $\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ を大きく underestimate しているのに対して、拡張 RSRG の結果は DMRG とよく一致している。これらの事実は、拡張 RSRG が精度の良い結果を与えており、我々が施した algorithm の拡張が有効に機能していることを示している。拡張 RSRG のデータは $\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ が r^{-2} の形で減衰する事を示しており、これは Fisher の結果を支持している。

次に random FM-AF case の結果を図 1(b) に示す。拡張 RSRG のデータは $m = 60$ までで十分収束しており、この場合も DMRG との一致は非常に良い。この拡張 RSRG のデータを見ると、 $\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ は log-log plot で上へと曲がっており、power-law よりも緩やかに減衰している。また、 $1/\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ を $\ln r$ の関数として plot してみると、データは非常にきれいな linear-behaviour を示す (図 1(b) inset 参照)。これらの結果から、random FM-AF chain の mean correlation は、

$$\langle\langle C(r) \rangle\rangle \sim \frac{a}{\ln(r/r_0)} \quad (a, r_0 = \text{const.}) \quad (5)$$

に近い形の r 依存性をもち、減衰は非常に緩やかであるが、LRO は存在しない、と結論できる。

さらに我々は、random AF case と random FM-AF case での基底状態の性質の違いをより詳しく調べるために、 $x = \ln C(r)$ の分布関数 $D(x; r)$ についても解析を行った。この分布関数については、Henelius らによって、random AF XX chain において、

$$D(x; r) = f(r)F(x/g(r)) \quad (f(r)g(r) = \text{const.}, \quad g(r) \propto \langle\langle \ln C(r) \rangle\rangle)$$

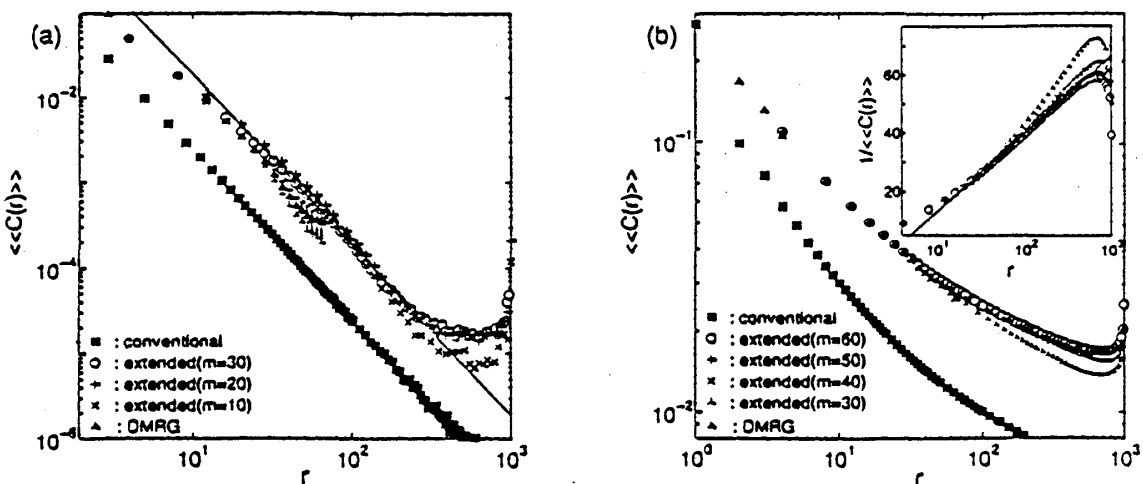


図 1: (a) random AF case (b) random FM-AF case における mean correlation $\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ の log-log plot. (a) の直線は r^{-2} decay に対応している。error bar のない plot の統計誤差は、symbol size よりも小さい。(b) inset: $1/\langle\langle C(r) \rangle\rangle$ の semi-log plot.

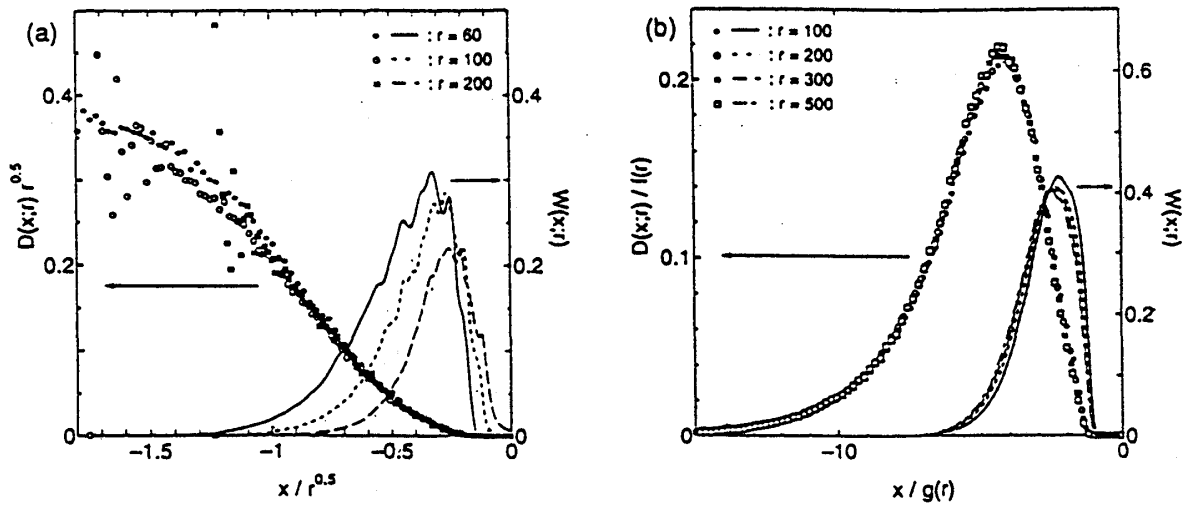


図 2: (a) random AF case (b) random FM-AF case における $F(x;r) = D(x;r)/f(r)$, $W(x;r)$ の plot. $g(r)$, $f(r)$ は、(a)では Fisher の解 [2] に従い $g(r) = r^{0.5}$, $f(r) = r^{-0.5}$ に、(b)では $g(r) = \langle \langle \ln C(r) \rangle \rangle / \langle \langle \ln C(r=200) \rangle \rangle$, $f(r) = 1/g(r)$ に、それぞれとっている。

の形の scaling 則が成り立つ事が示されている [5]。図 2 に見られるように、random Heisenberg chain に対しても、random AF、random FM-AF 両 case で、scaling 則が成り立っている。両 case の性質の違いは、scaling 関数 $F(x/g(r))$ の形の違いとして現れているが、その違いをよりはっきり見るために、各 spin pair の $\langle \langle C(r) \rangle \rangle$ への寄与を測る量として、

$$W(x;r) = \frac{e^x D(x;r)}{\langle \langle C(r) \rangle \rangle}, \quad (6)$$

を併せて図 2 に plot した。これを見ると、random AF case では $W(x;r)$ が値をもつのは $D(x;r)$ が非常に小さい範囲に限られているのに対し、random FM-AF case では、 $W(x;r)$ は $D(x;r)$ が十分大きな領域に peak をもっている。これらの結果は、random AF chain では、mean correlation $\langle \langle C(r) \rangle \rangle$ が距離 r にある スピンどうしがたまたま singlet を組むという rare event に支配されているのに対し、random FM-AF chain ではそのような rare event は支配的でなく、各スピンは他の多くのスピンと広く相関をもっている事を示している。

参考文献

- [1] S.-k. Ma, C. Dasgupta, and C.-k. Hu, Phys. Rev. Lett. 43(1979), 1434; C. Dasgupta and S.-k. Ma, Phys. Rev. B 22(1980), 1305.
- [2] D. S. Fisher, Phys. Rev. B 50(1944), 3799.
- [3] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. 75(1995), 4302; Phys. Rev. B 55(1997), 12578.
- [4] B. Frischmuth and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. 79(1997), 147; B. Frischmuth, M. Troyer, B. Ammon, and M. Sigrist, cond-mat/9808027.
- [5] P. Henelius and S. M. Girvin, Phys. Rev. B 57, 11457 (1998).