ひねり演算子を用いたスピン $S=1/2,1$ 梯子系での相転移の解析

東京理科大学 理学部　中村 正明，山本 貴博
東京大学 工学部　藤堂 眞治

量子スピン系の valence bond solid (VBS) 状態を特徴づける量として提案された、ひねり演算子の基底状態の期待値 z_L のスピン梯子系への応用を考える。また、string 秩序変数やレベルクロスの方法との関連を $Z_2 \times Z_2$ 対称性の破れという観点から考察する。

1　はじめに

量子スピン鎖における Haldane ギャップ状態に対する秩序変数としては den Nijs と Rommelse による string 秩序変数が良く知られているが、我々は string 秩序変数よりも合理的かつ実用的と考えられる秩序変数 z_L を提唱した [1]。これはサイズ L の系に対するひねり演算子の基底状態での期待値

$$z_L \equiv \langle\Psi_0| \exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{L}\sum_{j=1}^{L} jS_j^z\right)|\Psi_0\rangle \tag{1}$$

として与えられ、境界をまたぐ valence bond(VB) の本数の偶奇に応じて符号を変える性質をもつ。この秩序変数が「合理的」である理由は、主に次の 3 点である。(1) 隠れた反強磁性秩序状態という複雑な概念を経由せずに直接 VBS 状態を検出でき、物理的描象が捉えやすくなる。(2)string 秩序変数のような 2 点相関関数ではなく、1 つのスカラー量であるため、計算と解析が非常に容易になる。(3)VBS 状態の変化に応じて秩序変数の符号が変わるため、$z_L=0$ より相転移点の検出に用いることができる。

ただし、z_L の性質についてはまだいくつか疑問点が残されている。$S=1$ スピン鎖における Haldane 状態とは、string 秩序変数に対する非局所的ユニタリ変換により、$Z_2 \times Z_2$ 対称性の破れた状態として特徴づけられることが知られているが、z_L には $Z_2 \times Z_2$ 対称性の破れはどう反映されるのであろうか？また z_L はレベルクロスの方法と同様な転移点を与えるが、これら 3 つの方法は互いにどのように関係しているのか？本稿では、以上の疑問について、z_L をスピン梯子系に応用することを通じて明らかにしていく。

2　フラストレートした $S=1/2$ 梯子系

まず、フラストレーションのある $S=1/2$ スピン梯子模型

$$\mathcal{H}=\sum_{j=1}^{L}[J(\boldsymbol{S}_j\cdot\boldsymbol{S}_{j+1}+\boldsymbol{T}_j\cdot\boldsymbol{T}_{j+1})+J'\boldsymbol{S}_j\cdot\boldsymbol{T}_j+J_{\times}(\boldsymbol{S}_j\cdot\boldsymbol{T}_{j+1}+\boldsymbol{T}_j\cdot\boldsymbol{S}_{j+1})]$$

を $J>0$ において考える [2]。この系では $J_{\times} \ll J'$ の領域においては通常の $S=1/2$ 梯子系の性質を示し、rung dimer 相が出現する。ただし、隣接する 2 つの rung dimer が局所的に 90 度回転しているような配置も同種の状態とみなし、これらをまとめて resonating valence bond (RVB) 状態と呼ぶ。一方、$J' \ll J_{\times} \leq J$ の領域では、系は $S=1$ スピン鎖の性質を帯び、一種の Haldane 状態が出現する。この状態は Affleck Kenedy Lieb Tasaki (AKLT) の模型の基底状態に

類似していることから、AKLT状態と呼ぶ。この2状態の競合において、両相の特定のためには、複合スピン $\tilde{S}^z_{\mathrm{odd},j} \equiv S^z_j + T^z_j$, $\tilde{S}^z_{\mathrm{even},j} \equiv S^z_j + T^z_{j+1}$ を導入し、通常のstring秩序変数の $S=1$ のスピン演算子を置き換えることで、2種類の異なるstring秩序変数 $\mathcal{O}^z_{\mathrm{odd}}$, $\mathcal{O}^z_{\mathrm{even}}$ を定義する必要があると指摘されていた[3]。実際、このstring秩序変数を厳密対角化法で $L=8,10,12,14$ について計算すると、図1(a)に示すように、$J'/J=1$ において $J_\times/J \sim 0.6$ 付近で $\mathcal{O}^z_{\mathrm{odd}}$, $\mathcal{O}^z_{\mathrm{even}}$ の入れ替わりが起きる。ただし、このように複数のstring秩序変数の交点から転移点を特定できるのは梯子系のみで、スピン鎖では行えない。

一方、(1)式において、$S^z_j \to \tilde{S}^z_{\mathrm{odd},j}$ として z_L 定義すると、図1(b)に示すように、string秩序変数の入れ替わりが起こるのとほぼ同じ点で $z_L = 0$ となって、符号が逆転することが分かる。また、同様に $S^z_j \to \tilde{S}^z_{\mathrm{even},j}$ として z_L を定義することもできるが、この場合は前者と比較して常に逆の符号を持ち、どちらの定義でも同じ点で $z_L = 0$ となる[2]。このことから、z_L は1種類でstring秩序変数2種類分の情報を持つことが分かる。

また、1次元スピン鎖におけるVBの組変えによる相転移点は、ひねった境界条件下でのパリティーの異なる最低励起スペクトルの入れ替わりでも特定できることが指摘されている[4]。この場合、パリティーの偶奇は境界をまたぐVBの本数の偶奇に対応しているため、レベル交差は本質的に z_L の符号の入れ替わりと同じ物理的意味を持つ。図1(c)に示す数値対角化の結果からも前述の2つの方法と同じ転移点を与えることがわかる。このように、3つの異なる方法が同じ転移点を与えることが数値的に示された。

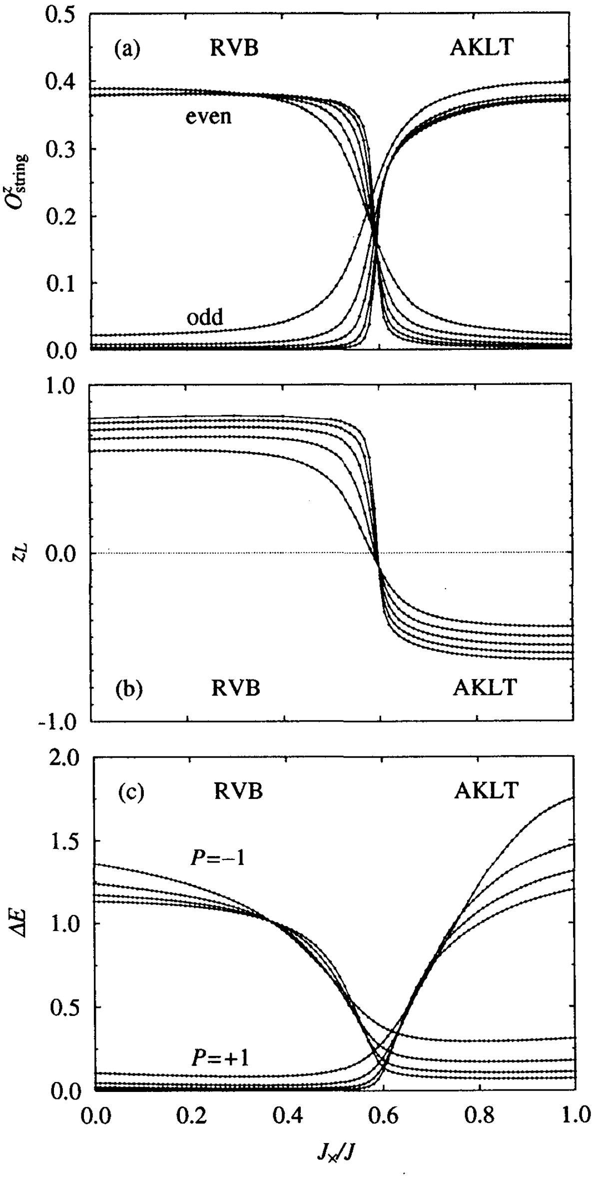

図1: $S=1/2$ 梯子系 ($L=8,10,12,14$, $J'/J=1$) における、(a)string秩序変数、(b)ひねり演算子の期待値 z_L、(c)ひねった境界条件下での励起スペクトルの交差。

さて、以上の3つの異なる方法の関連を $Z_2 \times Z_2$ 対称性の破れという視点から考えたい。$S=1/2$ スピン梯子系の臨界的性質はボゾン化法を通じて2次元Ising模型のそれと関連づけられることが知られている。つまり、4つのMajoranaフェルミオンを用いて書くことができ、このうち3つは等価な質量 $m_1 = m_2 = m_3 \sim (T-T_c)/T_c$ を持ち、他の1つは異なる質量 $m_4 = 3m_1$ を持つことから、全体として $SU(2) \times Z_2$ の対称性を持つことがわかる。これはスピンの $SU(2)$ 対称性と2本の足を持つことに対応している。いま、Ising模型のorder場を σ_i、disorder場を μ_i で表せば、ボゾン場との対応関係は $\exp[\mathrm{i}\sqrt{2}\phi_s] \to \mu_1\mu_2 + \mathrm{i}\sigma_1\sigma_2$ であることから、string秩序変数は

$$\mathcal{O}^z_{\mathrm{odd}} = \lim_{|x-y|\to\infty} \langle \cos[\sqrt{2}\phi_s(x)] \cos[\sqrt{2}\phi_s(y)] \rangle \to \langle \mu_1 \rangle^2 \langle \mu_2 \rangle^2 \quad (2)$$

$$\mathcal{O}^z_{\rm even} = \lim_{|x-y|\to\infty} \langle \sin[\sqrt{2}\phi_s(x)] \sin[\sqrt{2}\phi_s(y)] \rangle \to \langle\sigma_1\rangle^2\langle\sigma_2\rangle^2 \tag{3}$$

と表される。つまり、2つのstring秩序変数はそれぞれ、order場とdisorder場に対する$Z_2\times Z_2$対称性の破れを検出していることになる。一方、z_Lは

$$z_L \propto \langle\cos[\sqrt{8}\phi_s]\rangle \to \langle\mu_1\rangle^2\langle\mu_2\rangle^2 - \langle\sigma_1\rangle^2\langle\sigma_2\rangle^2 \tag{4}$$

となるから、符号の変化を伴うことで、2つのstring秩序変数の情報を同時に持つことがわかる。また、レベルクロス法で着目する2つの励起スペクトルは演算子$\cos[\sqrt{2}\phi_s] \to \mu_1\mu_2$と$\sin[\sqrt{2}\phi_s] \to \sigma_1\sigma_2$に対応しており、string秩序変数に現れるボゾン化された演算子そのものであることがわかる。このように、どの方法を用いても、AKLT相とRVB相はそれぞれIsing模型のorder場とdisorder場による$Z_2\times Z_2$対称性の破れた状態に対応していると結論でき、互いに等価であることがわかる。

3 $S=1/2$ボンド交替梯子系

同様の解析を、鎖内相互作用に逆位相のボンド交替のある$S=1/2$梯子系、つまり(1)式において$J_\times=0$, $J\to J[1-\delta(-1)^j]$とした系に対しても行った。この系においてもボンド交替δと鎖間相互作用J'の大小関係により、前節で議論したのと同様なAKLT相とRVB相との競合が起きる。この模型の重要性はVBの配置のトポロジカルな違いが、磁化曲線の低磁場領域におけるカスプの有無と関連づけられる点にある。つまり、VBを粒子と置き換える描象では、AKLT相ではフラストレーションがあり、RVB相ではフラストレーションが消えることから、分散関係の構造に違いが生じ、それが磁化曲線におけるカスプの有無として反映されるのである[5]。

ところが、この模型の相図についてはこれまで2つの相反する主張がなされてきた。Martin-Delgadoら[6]は$J',\delta\ll J$の領域では相境界の漸近形が$\delta\propto(J'/J)^{3/2}$となると主張しているのに対し、Cabraら[7]は$\delta\propto(J'/J)^{1/2}$であるとしている。我々はこの系については厳密対角化法とレベルクロス法を用いて相図を定め、Martin-Delgadoらの主張を支持する結果を得た。さらに、$SU(2)\times Z_2$の対称性を持つ通常の$S=1/2$スピン梯子系に対し、ボンド交替に起因ずる摂動$\mathcal{H}'=\delta\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4$の効果を考えることにより、解析的に$\delta\propto(J'/J)^{3/2}$の関係を得た。同様の解析はWangら[8]により、交替磁場hのある$S=1/2$梯子系についてなされており、交替磁場$\mathcal{H}'=h\sigma_1\sigma_2\mu_3\mu_4$の影響により、Néel相とAKLT相の間に現れる$c=1$の臨界線の漸近形が$h\propto(J'/J)^{3/2}$となり、ボンド交替梯子系とほぼ同じ構造の相図が現れることを示している。両者の違いは$SU(2)\times Z_2$の対称性が有効模型においてあらわに壊れるか否かという点のみである。

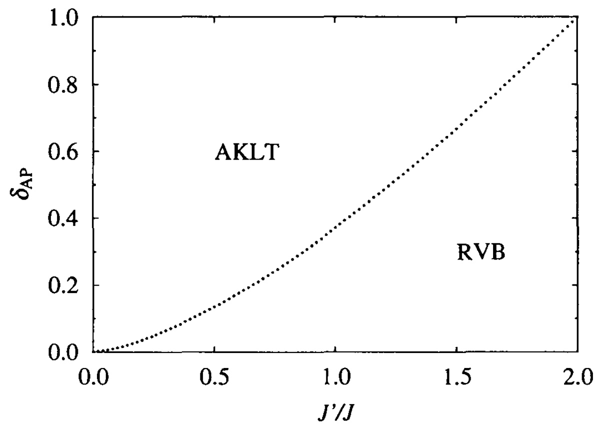

図 2: $S=1/2$ボンド交替梯子模型($L=12$)の相図。$J',\delta\ll J$の領域では$\delta\propto(J'/J)^{3/2}$となることが解析的、数値的に示される。

4　$S=1$ ボンド交替梯子系

次に $S=1$ 梯子系への応用を考える。まず、鎖内相互作用 J が一様な場合の基底状態は鎖間相互作用 J' の大きさによらず plaquette singlet solid (PSS) 状態で与えられることが既に解明されている [9]。これに対し、山本らは鎖内相互作用に逆位相のボンド交替 δ_{AP} が加わった場合の相図を議論し、snake Haldane (SH) 相と anti-parallel dimer (APD) 相の存在を指摘した [10]。PSS、SH、APD の各相は梯子を垂直に切った際の VB の本数がそれぞれ偶数、奇数、偶数であることを踏まえ、量子モンテカルロ法による z_L の計算により、$0.20<\delta_{\mathrm{AP}}<0.26$ の範囲でリエントラント転移が見られること、PSS 相と APD 相との間には、$J'/J>0$ では直接転移がないこと [11] などをより高い精度で示すことができた。さらに、 同位相のボンド交替 δ_{P} が加わった場合には PSS 相以外の相は存在しないという予想の確認も行った。

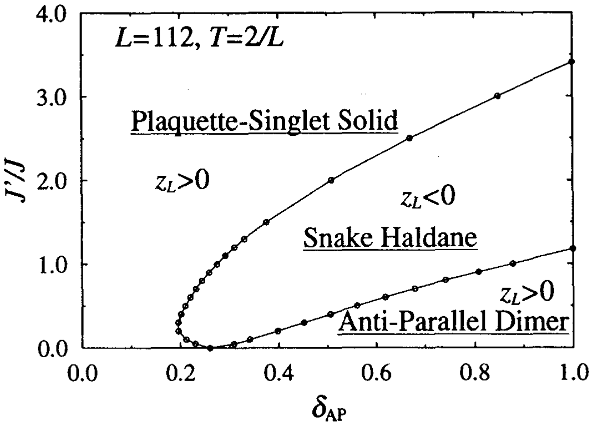

図 3: $S=1$ ボンド交替梯子模型 ($L=112$) の相図。

このように z_L は基底状態の情報のみで得られるため、多くの数値計算手法に対応でき、$S=1$ 梯子系のような Hilbert 空間の大きな系の解析には特に有効である。

参考文献

[1] M. Nakamura and S. Todo: to appear in Phys. Rev. Lett. (cond-mat/0112377).

[2] M. Nakamura and S. Todo: Prog. Theor. Phys. Suppl. **145** (2002) 217.

[3] E. H. Kim, G. Fáth, J. Sólyom and D. J. Scalapino: Phys. Rev. B **62** (2000) 14965.

[4] A. Kitazawa, J. Phys. A **30** (1997) L285.

[5] T. Yamamoto: 本講演概要集.

[6] M. A. Martin-Delgado, J. Dukelsky and G. Sierra: Phys. Lett. A **250** (1998) 430.

[7] D. C. Cabra and M. D. Grynberg: Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 1768.

[8] Y.-J. Wang, F. H. L. Essler, M. Fabrizio and A. A. Nersesyan: cond-mat/0112249.

[9] S. Todo, M. Matsumoto, C. Yasuda and H. Takayama: Phys. Rev. B **64** (2001) 224412.

[10] S. Yamamoto, T. Sakai and A. Koga: J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 1250.

[11] M. Matsumoto, S. Todo, M. Nakamura, C. Yasuda and H. Takayama: cond-mat/0206386.