

有限温度 DMRG による磁場下交代ボンド $S = 1$ スピン鎖の横帯磁率

— 磁場誘起長距離秩序 —

岡山大学 理学部 西山 由弘, 原田 勲

ハルデン系 (NDMAP, $\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_{14}\text{N}_2)_2\text{N}_3(\text{PF}_6)$) において、磁場誘起長距離秩序が観測されている。我々は、この実験結果 (温度-磁場相図) を再現する理論に取り組んでいる [1, 2, 3]: 後に詳述するように、まず、スピン鎖を有限温度 DMRG で第一原理的にシミュレートした上で、鎖間相互作用は、平均場近似で取り扱う。この結果、磁場が容易面に垂直な場合と、平行な場合の相境界線の特徴を再現できることが分かった。この違いは、次のようなふるまいが本質的である。前者は、朝永ラッティンジャー液体を反映して、横帯磁率の温度依存性が代数的であり、一方、後者は、素励起がマッシュピソリトンであり、横帯磁率が熱活性型 (指数関数) となる。つまり、相境界線が、一次元磁性の基底状態を、間接的に反映していることが分かった。最近、この計算を交代ボンドの場合に拡張しようと試みている。この場合、磁化過程にプラトーがあらわれることが知られている。したがって、温度-磁場相図中の秩序領域が、「ふた山」になることが期待される。

理論的な手法は、以前の手法 [1, 2, 3] を踏襲している: つまり、まず、一次元量子系

$$\mathcal{H} = \sum_i \{ (1 + (-1)^i \delta) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + D_\alpha (S_i^\alpha)^2 - H S_i^z \} \quad (1)$$

を、第一原理的にシミュレートする。ここで、 $D_z = 0.25 (\alpha = z)$ の場合が、磁場が容易面に垂直な場合で、一方、 $D_y = 0.25 (\alpha = y)$ の場合が、容易面に平行な場合である。主たる物理量は、横 staggered 帯磁率、

$$\chi_{\text{st}} = - \int_0^\beta d\tau \left\langle \sum_j (-1)^j S_j^z(\tau) S_1^z \right\rangle \quad (2)$$

である。これを用いて、相転移点の条件 $j\chi_{\text{st}}(T = T_c) = 1$ を得る。但し、磁気秩序は、微小な鎖間相互作用 j が関与していると考え、これを平均場理論により扱っている。

この χ_{st} の計算には、有限温度 DMRG を採用した。この方法は、他の方法に対して利点がある。量子モンテカルロ法では、横磁場で負符号が生ずるうえに、横の応答関数を求めるのがむづかしいという問題がある。また、有限サイズ対角化法では、外部磁場とともに、低励起状態が、入れ替わり立ち替わり順位交差して、応答関数がたついでしまう。さて、図に、 χ_{st} を示した。ここで、 $\delta = 0.5$ 、ブロック状態数 $m = 28$ であり、さらに、 $\beta/N_{\text{Trotter}} = 1/2, 1/3$ より Trotter 外挿をしてある。この結果から、 $\alpha = z$ のときは、磁化過程で、秩序相が二度出現しうることがわかる。ただし、二つ目の領域は小さい。 $\alpha = y$ の時は、 χ_{st} が、エンハンスされすぎて、ふた山が、ひと山に合わさってしまうということが分かる。以上の種々の特徴が、現在進行中の実験 (NTENP, $\text{Ni}(\text{C}_9\text{H}_{24}\text{N}_4)\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$) [4] で、観測されると期待している。

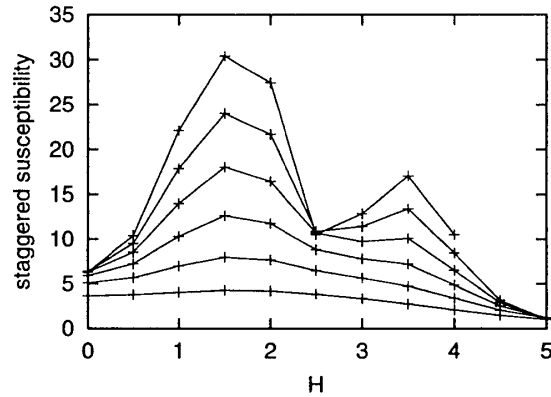


図 1: 横帯磁率 χ_{st} の磁場 H 依存性。磁場が容易面に垂直の場合 ($\alpha = z$)。温度は、下から、 $T = 1/2, 1/3, \dots, 1/7$ である。この場合は、長距離秩序相が二度出現し得る。

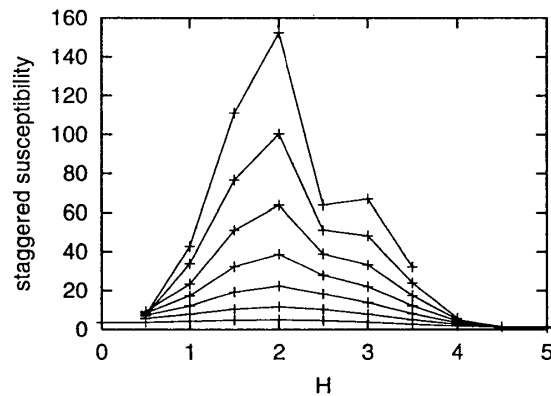


図 2: 横帯磁率 χ_{st} の磁場 H 依存性。磁場が容易面内の場合 ($\alpha = y$)。温度は、下から、 $T = 1/2, 1/3, \dots, 1/8$ である。この場合は、 χ_{st} がエンハンスされ過ぎて、長距離秩序相は一度しかあらわれない。

参考文献

- [1] Z. Honda, K. Katsumata, Y. Nishiyama and I. Harada, Phys. Rev. B **63** (2001) 064420.
- [2] Y. Nishiyama and I. Harada, J. Phys. Chem. Solid (2002).
- [3] I. Harada and Y. Nishiyama, Prog. Theor. Phys. Suppl. (2002).
- [4] M. Hagiwara *et al*, unpublished.