

21. 量子スピン系の Resonating Valence Bond の理論

小口武彦・北谷英嗣 (長岡技科大)

我々は Anderson¹⁾ が提案した Resonating Valence Bond (RVB) 状態に対しその構成要素の singlet ボンドを、必ずしも最隣接スピン対に限らないという拡張を行ない、スピン $1/2$ の有限系の反強磁性 Heisenberg モデルの厳密な解を求めることができた。

ハミルトニアンは結晶型によらずに次のように書ける。

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} 2 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) = \sum_{\langle i,j \rangle} (P_{i,j} - \frac{1}{2}). \quad (1)$$

和は最隣接格子点の対について行ない、 $\mathbf{S}_i$ は i 番目の格子点のスピン演算子、 $P_{i,j}$ は i と j のスピンの交換演算子である。交換積分は 1 としてある。 N 個のスピンから成る系の RVB 状態の 1 つの波動関数は、 $a, b, \dots$ をそれぞれの格子点上のスピン演算子とすると

$$\phi_i = [a, b][c, d][e, f] \dots, \quad (2)$$

$$[a, b] \equiv (\alpha_a \beta_b - \beta_a \alpha_b) / \sqrt{2}, \quad (3)$$

という形で表わされる。(2) で singlet 関数の総数は $N/2$ 個である。(2) に $\mathcal{H}$ を作用させると、スピンは交換するが、 $N/2$ 個の singlet ボンドの積という形は不変である。(2) の形をもつ異なった波動関数の総数 D_N は

$$D_N = \binom{N}{2} \binom{N-2}{2} \dots \binom{2}{2} / (N/2)! \approx (N/e)^{N/2}. \quad (4)$$

この D_N 個の波動関数は RVB 状態の部分空間を張る。しかし、それらは非直交であり over complete である。このことが RVB の扱いを複雑にする。

まず、重なり積分 $\langle \phi_i | \phi_j \rangle$ ($i, j=1, 2, \dots, D_N$) の行列を計算する。それを対角化すると、次の直交波動関数 $\tilde{\phi}_i$ が得られる。

$$\begin{matrix} n_0 \\ m \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} \tilde{\phi}_1 \\ \vdots \\ \tilde{\phi}_{n_0} \\ \tilde{\phi}_{n_0+1} \\ \vdots \\ \tilde{\phi}_{D_N} \end{matrix} \right\} \begin{bmatrix} \tilde{\phi}_1 & \dots & \tilde{\phi}_{n_0} & \tilde{\phi}_{n_0+1} & \dots & \tilde{\phi}_{D_N} \\ a_1 & & & & & \\ & \ddots & & & 0 & \\ & & a_{n_0} & & & \\ & & & 0 & & \\ 0 & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (m = D_N - n_0) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} |\tilde{\phi}_i\rangle = & \tilde{V}_{1,i}|\phi_1\rangle + \cdots + \tilde{V}_{n_0,i}|\phi_{n_0}\rangle + \tilde{V}_{n_0+1,i}|\phi_{n_0+1}\rangle + \cdots \\ & \cdots + \tilde{V}_{D_N,i}|\phi_{D_N}\rangle, \quad (i=1, 2, \dots, D_N). \end{aligned} \quad (6)$$

(5) の対角要素 $a_1, \dots, a_{n_0}$ は必ずしも 1 ではない。つまり $|\tilde{\phi}_1\rangle, \dots, |\tilde{\phi}_{n_0}\rangle$ は規格化されていない。これに対し $|\tilde{\phi}_{n_0+1}\rangle, \dots, |\tilde{\phi}_{D_N}\rangle$ は 0 であるから D_N 個の $|\phi\rangle$ に対し $m \equiv (D_N - n_0)$ 個の関係式を得る。これにより独立な $|\phi\rangle$ の数は n_0 であることがわかる。これらを基底関数と呼ぶことにする。基底関数の選び方は多数あるが、今後は $|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_{n_0}\rangle$ を基底関数に選ぶことにする。すると、残りの $|\phi_{n_0+1}\rangle, \dots, |\phi_{D_N}\rangle$ は基底関数の線形結合で表わされる。

上に述べた方法は正当的であるが、必ずしも簡単ではない。基底関数を決めるのは Pauling²⁾ の方法が便利である。それは N 個のスピンを円周上に並べ任意の 2 個ずつを線で結ぶ。線は singlet ボンドを表わす。これらの線が交差しない図形が基底関数である。第 1 図に $N = 6, 8, 10, \dots$ の場合を示す。こうして規格直交関数 $|\Phi_i\rangle$ が n_0 個の基底関数の線形結合で表わされる

$$|\Phi_i\rangle = \sum_{j=1}^{n_0} V_{j,i} |\phi_j\rangle. \quad (7)$$

H を (7) に作用させると

$$H|\Phi_i\rangle = \sum_{j,l}^{n_0} |\Phi_l\rangle \langle \Phi_l | V_{j,i} H | \phi_j \rangle = \sum_{j,k,l}^{n_0} V_{l,k}^t H_{k,j} V_{j,i} |\Phi_l\rangle \quad (8)$$

$$V_{l,k}^t = V_{k,l}, \quad H_{k,j} \equiv \langle \phi_k | H | \phi_j \rangle. \quad (9)$$

したがって永年方程式は

$$|V^t H V - E I| = 0 \quad (10)$$

となる。 I は単位行列である。有限系に対し (10) を解いて、その固有値を、他の方法で求められている厳密解と比べると完全に一致する。つまり R V B 状態は Heisenberg モデルの厳密解である。

次に基底関数のスピン多重度を調べよう。全スピンの 2 乗 $(S_{tot})^2 \equiv (\sum_{i=1}^N S_i)^2$ は H と交換することはよく知られている。事実 $(S_{tot})^2$ を基底関数の 1 つに演算すると

$$(S_{tot})^2 \phi_i = 0, \quad (11)$$

が得られるので、R V B 状態は $S_{tot} = 0$ であり、基底関数 n_0 は第 2 図で示した分岐図で $N, S_{tot} = 0$ における独立な関数 $N! / \{(N/2)!(N/2+1)!\}$ に等しい。このことは結晶型には依存しない。

基底の 1 つの singlet を triplet に変えたもの、即ち

$$\psi_j = \{a, b\} [c, d] [e, f] \cdots, \{a, b\} = (\alpha_a \beta_b + \beta_a \alpha_b) / \sqrt{2} \quad (12)$$

これに $(S_{\text{tot}})^2$ を作用させると

$$S_{\text{tot}}^2 \psi_j = 2 \psi_j \quad (13)$$

がえられる。つまり (12) のタイプの基底関数は $S_{\text{tot}} = 1$ に属する。この場合の独立な基底関数の数は第2図の N , $S_{\text{tot}} = 1$ に対する数と一致して、それを用いて得られた解は、他の方法で得られたものと完全に一致する。しかし、(2) で2個の singlet を2個の triplet で置き換えたものは容易に予想されるように $S_{\text{tot}} = 2$ と0が混ざる。

我々の方法は互いに最隣接でないスピン間の singlet ボンドをも考慮することが特徴であるが、そのようなボンドが基底状態に含まれる割合を調べるために、平均長 AL を定義する。いま R V B の基底状態 $|\Psi_{g.s.}\rangle$ を基底関数 $|\phi_i\rangle$ の線形結合

$$|\Psi_{g.s.}\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle \quad (14)$$

と書くとき、基底関数 $|\phi_i\rangle$ の AL は、例えば1次元格子の $N=6$ の場合は、第1図の右側の基底関数に例をとると2番と3番及び5番と6番の距離はともに1であるのに対し、1番と4番の距離は3であるから、この図形の AL を $\ell = (3+1+1)/3 = 5/3$ と定義する。 ℓ はもちろん結晶型に依存する。したがって (14) の AL は

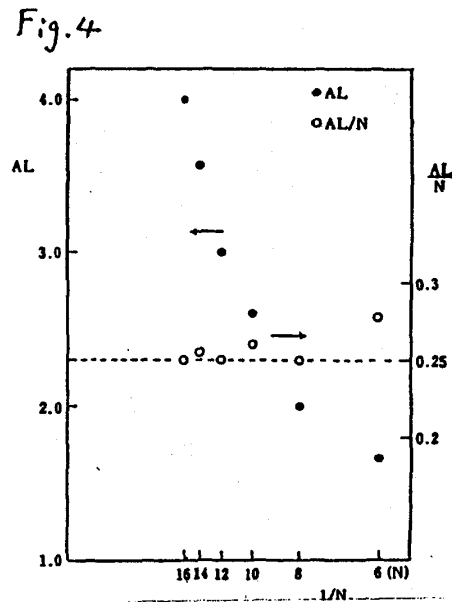
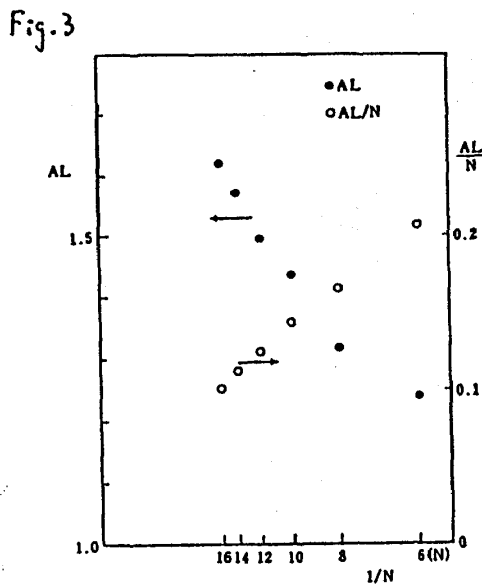
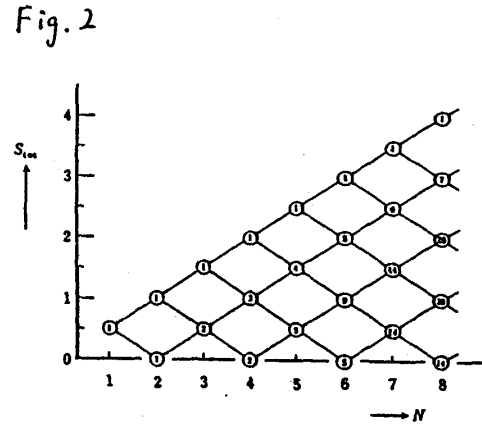
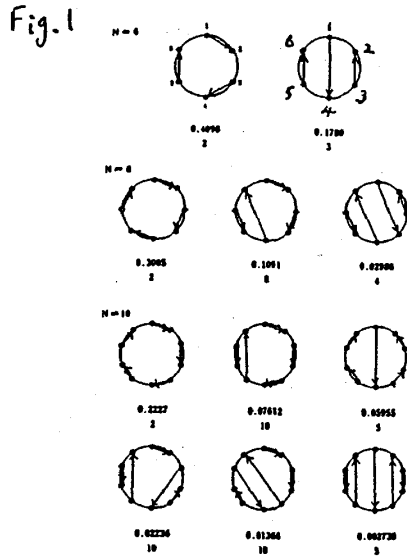
$$AL = \sum_i \sum_j c_i^* c_j \langle \phi_i | \phi_j \rangle (\ell_i + \ell_j) / 2 \quad (15)$$

このようにして計算された1次元格子の AL を最隣接相互作用のみの場合 (第3図) と infinite range 相互作用の場合 (第4図) を示す。前者の場合は、 $N \rightarrow \infty$ に対し $AL/N \rightarrow 0$ ($AL \rightarrow N^\xi$, $\xi < 1$) となるが、後者の場合は $AL/N \rightarrow 0.25$ になる。くわしい報告は文献3を参照してほしい。

我々の研究と全く独立に千葉大のグループの研究⁴⁾ が10月の広島における日本物理学会で報告されている。

文献

- 1) P.W.Anderson: Mater.Res.Bull. 8 (1973) 153.
- 2) L.Pauling: J.Chem.Phys. 1 (1933) 280.
- 3) T.Oguchi and H.Kitatani: Submitted to J.Phys.Soc.Jpn.
- 4) J.Hamada, J.Kane, S.Nakagawa and Y.Natsume: 物理学会予稿集 4p-D5-5 3 (1988) 379.



- 才1図 The bases of a linear chain lattice for $N=6, 8$ and 10 .
 Numeral under each graph denotes the value of the coefficient of a linear combination in the eigenfunction of the ground state. Integers denotes the number of equivalent bases obtained by symmetry operations.
- 才2図 Branching rule diagram. Numerals represent the number of independent functions for N and S_{tot} .
- 才3図 Average length AL and AL/N versus $1/N$ for $N=6, 8, \dots, 16$ of a linear chain lattice with nearest neighbor interactions.
- 才4図 Same as Fig. 3 except that they are infinite range interactions.