

反強磁性三角格子上の量子スピン系 —— 基底状態と有限温度

東工大 理 西森秀樹・田口善弘・小口武彦

1. はじめに

三角格子上に Heisenberg スピンを配置するとその基底状態は古典的には図1のようないわゆる 120° 構造をとる。この 120° 構造には、隣接するスピンの相対角が $+120^\circ$ と -120° の二つの場合があり、この二重縮退が Ising 的な変数の役割を果たして特異な相転移を起こすことが知られている¹⁾。また、この古典的基底状態のまわりの量子効果によるゆらぎをスピン波近似で計算すると²⁾ 発散項は現れず、したがって古典状態は少なくとも準安定である。フラストレーションのない系だと、このような古典状態 + 量子ゆらぎという描像がほぼ正確に量子系の基底状態を表わすと考えられるが、強くフラストレートした三角格子上の反強磁性的な $S=1/2$ の系の場合には、全く違った状態、

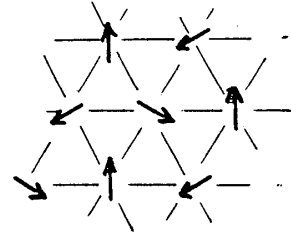
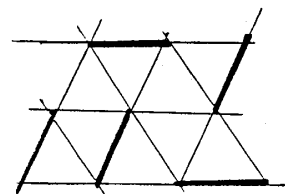


図1. 古典的基底状態。

—— Resonating Valence Bond (RVB) 状態 —— が $T=0$ で実現されているのではないかという提案が Anderson によってもたされ、³⁾ それをめぐって、解析的⁴⁾ 及び数値的^{5),6)} な議論がなされて来た。

RVB状態においては、図2に示すように隣接する二つのサイトのスピンの singlet のペアを作っている。ペアの作り方は数多くあり、その色々な作り方がほぼ同じ重みで混じり合、て全系の波動関数を構成している。前述の古典状態 (+ 量子ゆらぎ) が 120° 構造を基本とし

図2. singlet ペアの作り方のひとつ

たから、ちりとしたいわば「スピン固体」であるのに対し RVB状態は singlet のペアが動き回っている「スピン流体」であると言えよう。RVB状態を特徴付ける要素は二つある。ひとつは、各ペアの作り方の混じり合いの重み(振幅)であり、もうひとつは、混合の位相(符号)である。前者について言えば、最隣接だけでなく、遠く離れたサイトも singlet のペアを作ることと許せば、そのようなペアの作り方の集合は完全系を張ることがわか、ており、^{3),4),6),7)} 従って、 singlet のペアだけで基底関数が書けるということ自体は実は自明である。重要なのは、最隣接あるいはほんの近くのサイトのペアで作った状態だけで基底波動関数は本質的に尽きているということである。数値計算によ、て⁵⁾ 最隣接だけで書いた RVB状態は有思系においては、正しい基底状態のかなりの部分を占めていることがわか、てい、る。

次に、位相については、結論から言えばまだはっきりとしたことはわか、ていない。特別な場合には位相がある規則にもとづいて決まり波動関数が全体として Bose 凝縮に類似の位

相コヒーレンスを持つことが示されているが、⁴⁾一般にどうなるかは不明である。

そこで、本稿では位相の問題にのみ注目し、次節でまずフラストレーションのない場合に位相が果たす役割について復習する。次いで、三角格子反強磁性体について、何かゆかれば位相コヒーレンスの存在が言えるのかを考察する。最後に、このような基底状態の特徴をいまと上で、有限温度における物理量のふるまいを有限系の数値計算から推測する。

2. フラストレーションのない系⁸⁾

フラストレーションのない系の代表として正方格子上の反強磁性的量子スピン系を考える。基底状態の波動関数を、各サイトの S_z を対角化する表示の線型結合で書く：

$$\psi = \sum c_\mu \psi_\mu \quad (1)$$

ψ_μ というのはたとえば図3のような状態である。この波動関数で Hamiltonian の期待値 E_ψ を作り、それを最小にするべく係数 $\{c_\mu\}$ を決定すれば良い。すなわち

$$E_\psi = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | H_{xy} | \psi \rangle + \langle \psi | H_z | \psi \rangle$$

Hamiltonian の z 成分 H_z は今の表示 $\{\psi_\mu\}$ で対角的であり、したがって、 $\langle \psi | H_z | \psi \rangle$ の中では係数 $\{c_\mu\}$ は絶対値の2乗 $|c_\mu|^2$ の形でしか入ってこない。よって、 $\{c_\mu\}$ の位相の決定の問題には $\langle \psi | H_{xy} | \psi \rangle$ の項のみを考慮すればよい。

状態 μ から状態 ν に H_{xy} によ、 π 移るとすると

$$\langle \psi | H_{xy} | \psi \rangle = J \sum_{\mu, \nu} c_\mu c_\nu^* = J \sum_{\mu, \nu} |c_\mu c_\nu| \cos(\theta_\mu - \theta_\nu) \quad (2)$$

と書ける。ここで θ_μ は c_μ の位相である。 $J > 0$ の場合には (2) を最小にするには、各 $\{\mu, \nu\}$ の相について $\cos(\theta_\mu - \theta_\nu) = -1$ にすることが出来ればよい。そこで、たとえば、 H_{xy} によ、 π 移ると移り変る4つの状態 $\nu, \mu, \lambda, \delta$ を考えたと、図4からわかるように、正方格子であるということから、とりの状態との相対位相をいつも π に選ぶことが可能である。すなわち、振幅 $\{|c_\mu|\}$ とはかかわりなく、いつも位相変数について (2) をすべて $\{\mu, \nu\}$ の組において最小にすることが出来る。言い換えれば、振幅と位相を完全に分離して決定出来る。これが、フラストレーションのない系の基底波動関数の特徴である。

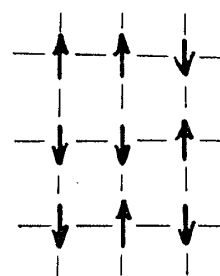


図3. $\{S_z\}$ を対角化する状態の ψ と

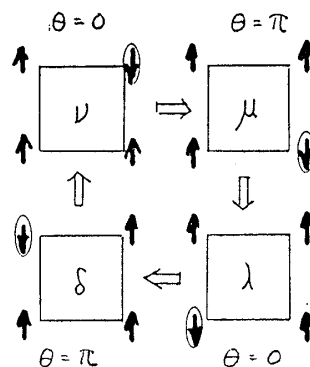


図4. 正方格子での位相変数の移り変わり

3. 3角格子反強磁性体

前節の議論を3角格子に適用すると矛盾をきたすことは直ちに明らかになる。図5のように、3角格子上では3つのステップでもとの状態に戻り、相対位相を常に π にすることは出来ないのである。それゆえ、前節の(2)の値を最小にするにあたってどこかで $\cos(\theta_\mu - \theta_\nu) = +1$ なる組 $\{\mu, \nu\}$ を選ばざるを得ず、その組は当然ながら振幅 $|c_\mu c_\nu|$ が小さい所となる。

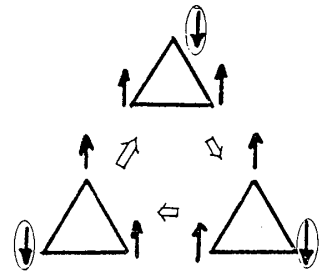


図5. 3角格子上での変換

(Hamiltonianの性質から、 c_μ はいくとも実数に選ぶことにしても一般性は失われないから、 $\cos(\theta_\mu - \theta_\nu) = +1$ か -1 である。)

したがって今の場合、振幅と位相が密接にからみ合っており問題は複雑である。

この複雑さの起源を考えると、図5でもわかるように、波動関数 ψ の展開のベースとして各サイトのスピンのz成分 S_z^2 を対角化する表示をとったことが重要な役割を果たしている。そこでかゆりに、1.で述べたsingletのペアの線型結合で ψ を書くとうまく行くのではないだろうかというのがRVB状態における位相コヒーレンスの考え方である。たとえば、図6に示すように $N=6$ の場合、全体のスピン量子数 S が0の空間は、singletのペア(の直積)の線型結合で完全に張ることが出来る。基底状態の波動関数 ψ をこのようなベースの和

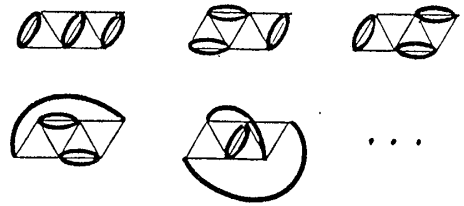


図6. Singletのペアの作り方の色紙

$$\psi = \sum_j c_j \psi_j$$

で書き、Hamiltonianの期待値

$$E_\psi = \sum_j c_j^* c_j \langle \psi_j | H | \psi_j \rangle \quad (3)$$

を最小にするべく係数 $\{c_j\}$ を決定する。もし、各 $\{i, j\}$ について常に $c_i^* c_j \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ (+c.c.)が負になるように $\{\psi_j\}$ の位相を選ぶことが可能ならば、 $\{S_z^2\}$ をベースにした時に生じた振幅と位相のからまり合いの問題は解決されたことになる。基底状態の波動関数の位相が、このように振幅と分離された形で矛盾なく決定出来たとするとそれは位相コヒーレンスと言うべき状況ではないか、というのがAnderson³⁾の提案である。

いくつかの特別な系の場合には確かに上記の事実が成立していることが確認されているが、⁴⁾一般的な証明はまだ存在しない。手掛りを得るための有効な手段として、有限系について実際に係数 $\{c_j\}$ を求めて(3)の各項を評価することが考えられる。 $N=20$ の系だとベースの数は数万であり、したがって(3)の和の項数は数億のオーダーになる。(ほとんどのベースの $\{i, j\}$ の組に対して $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle \neq 0$ である。)それゆえ、もし上述の位相の決定が必ずしもうまく行かないとすると、数億個を調べなければならないという反例が見つかるだろうというのが見通しである。実際には $\{\psi_j\}$ のベースでHamiltonianを対角化し、係数

$\{C_j\}$ を求めるのは簡単な作業ではないが, Soosたちの方法⁷⁾を応用すれば原理的な困難はない。プログラミング中である。

位相コヒーレンスに関連してもうひとつ重要なことは、秩序パラメータをどう選ぶかという問題である。2. で述べたフラストレーションのない場合だと、 $\{S_i^z\}$ を対角化する表示で位相が簡単に決まったことからわかるように、 $\{S_i^z\}$ 表示で大きな対角成分を持つ $(S_i S_i^z)^2$ や $(S_i S_i^x)^2 + (S_i S_i^y)^2$ が秩序パラメータの資格を持つ。3角格子では事情はもっと複雑である。 $\{Y_j\}$ 表示で対角成分が主要な役割を果たすことが必要条件であるように一見思われるが、 $\{Y_j\}$ が非直交のベースであることがどうまいてくるかすぐにわからない。具体的に何をもって秩序パラメータとすれば良いかは今後の大きな課題である。

4. 有限温度

以上基底状態を特徴付ける位相について述べてきたが、最終的な興味はRVB状態が有限の温度範囲で顕著な役割を果たしているか、すなわち有限温度で相転移があるかどうかということにある。これを調べる一手段として、ゆゆゆは有限系 ($N \leq 13$) のすべての固有値を数値的に求め、比熱と帯磁率の N, T 依存性を調べた。サイズはいさゝか、もっと大きな系についての Monte Carlo simulation⁹⁾との相補的な役割が以下で見られるように期待される。図7の Heisenberg、図8の XY の両モデルについては、比熱にはひとつピークがあるのに対し、帯磁率には $kT/J \geq 1$ では目立った構造がない。これらの特徴は N (あるいは格子形) にあまり依存せず、また Heisenberg の場合には $N = 6 \times 6$ についてなされた Monte Carlo simulation⁹⁾とも $kT/J \geq 1$ で χ の値が良く一致している。

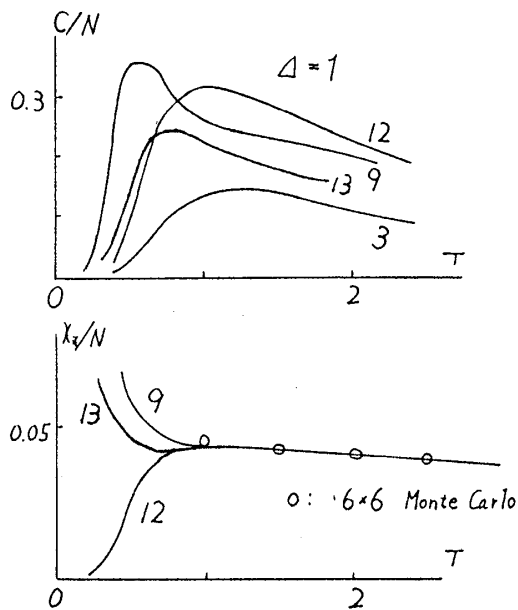


図7. Heisenberg model

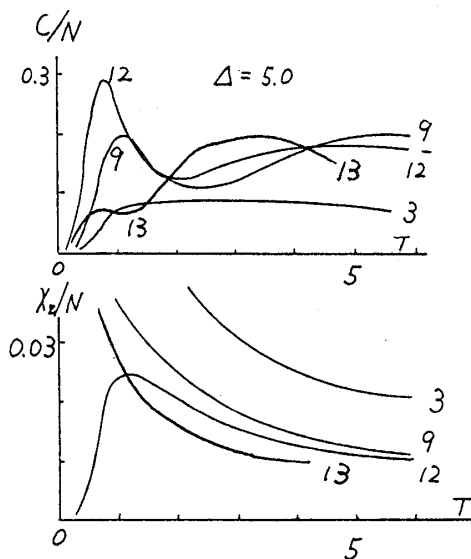


図9 Ising-like model

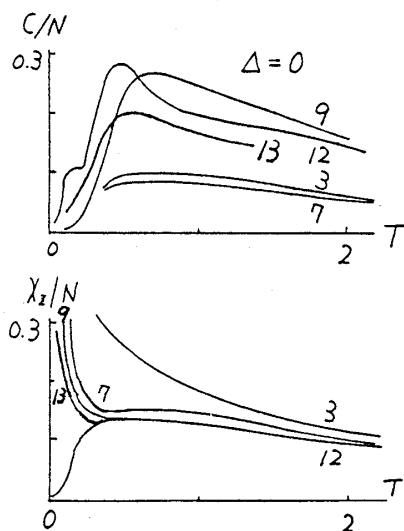


図8. XY model

したがって、少なくとも $kT/J \geq 1$ では χ に強い特異性をもたらすような相転移は存在しないと結論出来る。

次に、Ising 的な項 H_z が強い場合には、図 9 に見られる通り比熱に 2 つのピークが現われる。ピークの位置は格子によって多少動くものの、2 つあるという定性的な事実は一定である。対応する古典系では、磁化の縦成分と横成分が順次秩序化することがわかっており、¹⁰⁾ 量子系でもそれに相当する現象が図 9 で示唆されているとも考えられる。しかしながら、Fazekas と Anderson⁴⁾ によると、RVB 状態という極めて量子的な構造は、Ising 性が強い領域でも明確に存在しており、有限温度の相転移がそのような量子性をどう反映しているかは容易には想像出来ない。

文献

- 1) S. Miyashita and H. Shiba, J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 1145.
H. Kawamura and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 4138.
- 2) T. Oguchi, J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1983) Suppl. p. 183.
H. Nishimori and S. J. Miyake, Prog. Theor. Phys. 73 (1985) 18.
S. J. Miyake, Prog. Theor. Phys. 74 (1985) 468.
- 3) P. W. Anderson, Mat. Res. Bull. 8 (1973) 153.
- 4) P. Fazekas and P. W. Anderson, Phil. Mag. 30 (1974) 423.
- 5) T. Oguchi, H. Nishimori and Y. Taguchi, J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) No. 1
- 6) A. Sütő and P. Fazekas, Phil. Mag. 35 (1977) 623.
- 7) S. Ramasesha and Z. G. Soos, Int. J. Quantum Chem. 25 (1984) 1003.
- 8) H. Nishimori, J. Stat. Phys. 26 (1981) 839.
- 9) M. Takasu, S. Miyashita and M. Suzuki, preprint.
- 10) S. Miyashita and H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3385.