

空間構造をもつ一次元量子スピン系の基底状態

神戸大理

利根川 孝*

- [1] 二個の $S=1/2$ スピンと二個の $S=1$ スピンが交互に並んだ量子スピン鎖の基底状態 [共同研究者: 引原俊哉 (神戸大自然科学), 鎗木誠 (神戸大国際文化), 西野友年 (神戸大理), 宮下精二 (東大工), H.-J. Mikeska (ITP, Univ. Hannover)]

1983 年におけるハルデン仮説¹⁾の提唱及びそれに関連したその後の多くの数値的, 解析的, 実験的研究を契機として, 近年, 低次元量子スピン系の量子非磁性基底状態における相転移の問題が盛んに研究されている. このような量子非磁性基底状態における相転移を理解する上で, Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki²⁾によって導入された Valence-Bond-Solid (VBS) 描像, 即ち, 量子非磁性状態にある各相が ‘シングレットペア (スピン一重項) の敷き詰め方’ の違い³⁾によって理解できるという考え方は, 非常に重要である. この描像に対する, 格子が作り出すミクロな空間的構造の果たす役割は大きく, 実際, 各種のフラストレート系, ボンド交代系, 梯子格子系, ディブリート系等で起こる興味ある相転移が数多く議論されている. 例えば, 一般の大きさ S をもつ量子スピンからなるボンド交代鎖において, ボンド交代パラメータ δ の値 ($|\delta| \leq 1$) を変化させるとき, $2S$ 回エネルギーギャップの消滅を伴う相転移が起こることが, 少なくとも $S \leq 2$ の場合について数値的に確かめられ,⁴⁾ 出現する $2S+1$ 個の基底状態が VBS 描像によってうまく表されることが分かっている.⁵⁾

我々は, このような空間的構造として, 二種類の大きさのスピンの配列の仕方を取り入れることを目的として, 次のハミルトニアン:

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell=1}^{N/4} (J_1 \vec{s}_{4\ell-3} \cdot \vec{s}_{4\ell-2} + J_2 \vec{s}_{4\ell-2} \cdot \vec{S}_{4\ell-1} + \vec{S}_{4\ell-1} \cdot \vec{S}_{4\ell} + J_2 \vec{S}_{4\ell} \cdot \vec{s}_{4\ell+1}) \quad (1)$$

($J_1 > 0, \infty > J_2 > -\infty$) で記述される, 二個の $S=1/2$ スピン ($\vec{s}_{4\ell-3}, \vec{s}_{4\ell-2}$) と二個の $S=1$ スピン ($\vec{S}_{4\ell-1}, \vec{S}_{4\ell}$) が交互に並んだ量子スピン鎖 (図 1 参照) の基底状態を調べている.⁶⁾

先ず, Lieb-Mattis theorem⁷⁾ を用いることにより, 系の基底状態が非磁性状態であることが容易に分かる. また, $J_2 \rightarrow +\infty$ 及び $J_2 \rightarrow -\infty$ の極限に Wigner-Eckart theorem⁸⁾ を適用することにより, 基底状態及び低エネルギー励起状態に関する限り, 系がそれぞれ $S=1/2$ 及び $S=3/2$ ボンド交代鎖と同等になることが示せる. この結果は, それぞれの極限で, $J_1(>0)$ 対 J_2 平面上の基底状態相図に一本及び三本の massless line (エネルギーギャップの消失を伴う二次相転移線) が現れることを示している. 更に, $J_1 \rightarrow +\infty$ の極限において摂動計算を行うことにより, 基底状態及び低エネルギー励起状態に関する限り, 系が J_2 の符号に関して対称な $S=1$ ボンド交代鎖と同等になることを示すことが出来, このことから, この極限で基底状態相図に四本の massless line が現れることが分かる. また, $J_1 \ll 1, |J_2| \ll 1$ の極限において摂動計算を行

* E-mail: tonegawa@kobe-u.ac.jp

うことにより, $J_1 \sim 0$, $J_2 \sim 0$ での massless line が $J_1 = (4/3)J_2^2 + 2J_2^3 + (1/27)J_2^4 + \dots$ で与えられることが分かる.

上記の平面上の基底状態相図の詳細を明かにするために, 有限系の対角化法及び密度行列繰り込み群法⁹⁾を用いた研究を行った. 即ち, 先ず, 種々の J_1 , J_2 の組に対して全スピン数 N を $N=16, 32, 64, 128$ に選んでエネルギーギャップ $\Delta(N)$ を計算し, それ等を $N \rightarrow \infty$ に外挿する. 次に, 得られた外挿値 $\Delta(\infty)$ を J_1 (又は, J_2) の関数としてプロットし, $\Delta(\infty)=0$ となる J_1 (J_2) の値 J_{1c} (J_{2c}) を評価する. 最後に, $J_1(>0)$ 対 J_2 平面上に得られた点 (J_2, J_{1c}) , (J_{2c}, J_1) をプロットして, massless line を描く. このようにして得られた基底状態相図を図2に示す. 図から分かるように, この相図内に四本の massless line が存在し, これらによって半平面が六つの領域 (a)~(f) に分けられる. 各領域での基底状態相が VBS 描像によってどのように表されるかを見るために, 同様な方法を用いて, J_1 (J_2) の値を与えたときの $N=128$ の系の基底状態における最近接スピン相関関数及びストリング相関関数の J_2 (J_1) 依存性を計算した. これらの結果より, 各領域での基底状態相が図3の A_1 , A_2 , $B_1 \sim B_4$, $C_1 \sim C_3$ で示すような VBS 表示によって記述されることが分かる. 例えば, 領域 (a) では, $J_2 \rightarrow \infty$ であるか $J_1 \rightarrow \infty$ であるかによって, 基底状態相は A_1 或は C_3 で表される. これら A_1 及び C_3 の一方は他方から, シングレットペアの敷き詰め方を局所的に組み換えることによって得られ, 従って両者の間に相転移は存在しないと考えられる. また, 領域 (c) では, J_2 が有限であるか $J_2 \ll -1$ であるかによって, 基底状態相は C_1 或は B_3 で表され, 両者の違いは対称化される $S=1/2$ スピンの取り方の違いであり, これらの間には相転移は存在しない.

[2] 強磁性的なボンド交代最近接相互作用と反強磁性的な一様次近接相互作用をもつイジング型 $S=1/2$ 量子スピン鎖の基底状態 [共同研究者: 松本久志 (神戸大自然科学), 引原俊哉 (神戸大自然科学), 鍋木誠 (神戸大国際文化)]

厳密対角化法及び密度行列繰り込み群法⁹⁾を用いて, 強磁性的なボンド交代最近接相互作用と反強磁性的な一様次近接相互作用をもつイジング型 $S=1/2$ 量子スピン鎖 (図4) の基底状態を議論する. この系を記述するハミルトニアンを次のように書く:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\ell=1}^{N/2} h_{2\ell-1, 2\ell} + J_1 \sum_{\ell=1}^{(N/2)-1} h_{2\ell, 2\ell+1} + J_2 \sum_{\ell=1}^{N-2} h_{\ell, \ell+2}, \quad (2a)$$

$$h_{\ell, \ell'} = \gamma (S_{\ell}^x S_{\ell'}^x + S_{\ell}^y S_{\ell'}^y) + S_{\ell}^z S_{\ell'}^z. \quad (2b)$$

ここで, $0 \geq J_1 \geq -1$, $J_2 > 0$, $1 > \gamma > 0$ とする. ($J_1 < -1$ に対する熱力学極限 ($N \rightarrow \infty$) での結果は $0 \geq J_1 > -1$ に対する熱力学極限での結果から容易に導ける.)

$J_1 = -1$ の場合 (最近接相互作用も一様である場合) については熱力学極限での基底状態が既に調べられており, γ の値を与える時, $0 < J_2 < J_{2,c1}$, $J_{2,c1} < J_2 < J_{2,c2}$, $J_{2,c2} < J_2$ で, それぞれ, 全スピンの z -成分 $M \equiv \sum_{\ell=1}^N S_{\ell}^z$ の値が $M=N/2$, $N/2 > M > 0$, $M=0$ である状態が基底状態となり, $J_{2,c1} < J_2 < J_{2,c2}$ での M の値は J_2 の関数として $M=N/2$ から $M=0$ まで連続的に減少することが分かっている.¹⁰⁾ 即ち, J_2 の値を 0 から増加させる時, 最近接相互作用と次

近接相互作用との間の競合の効果で、強磁性状態と磁化が 0 の非磁性状態との間に、飽和していない有限の大きさの磁化をもつ状態 (以下、中間状態と呼ぶ) が基底状態として出現することがこの系の特徴である。この中間状態は、2-マグノン束縛状態が凝縮した状態であることが分かっている。^{11),12)} 一方、 $J_1=0$ の場合は、相互作用間に競合のない梯子格子系に対応し、熱力学極限での基底状態は、 J_2 の増加と共に $J_2=J_{2,c1}=J_{2,c2}=0$ で $M=N/2$ の状態から $M=0$ の状態に一次転移することが Lieb-Mattis theorem⁷⁾ を適用することによって容易に分かる。

本研究で、我々は、 γ をいくつかの値に固定し、上記の数値的方法を用いて、熱力学極限での J_1 対 J_2 平面上の基底状態相図を調べた。例えば、 $\gamma=0.5, 0.25$ の場合、 $N=16, 20, 24, 28, 32, 40, 48, 64, 80, 100, 128$ に対する数値結果によると、有限系の基底状態磁化の値は J_2 の増加と共に $M=N/2, (N/2)-2, \dots, 2, 0$ の如く 2 ずつ減少する。 J_1 の値を定めたときの各 N に対する $M=N/2$ の状態から $M=(N/2)-2$ の状態への転移を与える J_2 の値 $J_{2,c1}(N)$ 及び $M=2$ の状態から $M=0$ の状態への転移を与える J_2 の値 $J_{2,c2}(N)$ を求め、それらを $N \rightarrow \infty$ に外挿することにより、それぞれ、 $J_{2,c1}$ 及び $J_{2,c2}$ の値を決定する。 J_1 対 J_2 平面上に決められた点 $(J_{2,c1}, J_1)$, $(J_{2,c2}, J_1)$ をプロットすることにより、基底状態相図を得ることが出来る。 $\gamma=0.5$ の場合に得られた結果を図 5 に示す。図から分かるように、中間状態が基底状態となる領域は $J_1=-1$ のとき最大で、 $|J_1|$ の値の減少 (或は増加) と共に急激に減少する。 $|J_1|$ の値を 1 から減少させるとき、中間状態が基底状態となる領域が $J_1 \rightarrow 0$ まで残るかどうかなについては、本数値的研究からのみでは結論出来ない。

- 1) F. D. M. Haldane: Phys. Lett. **93A** (1983) 464; Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1153.
- 2) I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb and H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 799; Commun. Math. Phys. **115** (1988) 477.
- 3) 宮下精二: 大阪大学低温センターだより **97** (1997) 17.
- 4) S. Yamamoto: Phys. Rev. B **55** (1997) 3603 及び引用文献.
- 5) D. Guo, T. Kennedy and S. Mazumdar: Phys. Rev. B **41** (1990) 9592.
- 6) T. Tonegawa, T. Hikihara, M. Kaburagi, T. Nishino, S. Miyashita, and H.-J. Mikeska: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1000; T. Tonegawa, T. Hikihara, T. Nishino, M. Kaburagi, S. Miyashita and H.-J. Mikeska: J. Magn. Magn. Mater. **177-181** (1998) 647.
- 7) E. Lieb and D. Mattis: J. Math. Phys. **3** (1962) 749.
- 8) See, for example, J. J. Sakurai: *Modern Quantum Mechanics* (Benjamin/Cummings, Menlo Park, 1985) p. 238.
- 9) S. R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; Phys. Rev. B **48** (1993) 10345.
- 10) T. Tonegawa, I. Harada and J. Igarashi: Prog. Theor. Phys. Supplement, No. 101, (1990) 513.
- 11) J. Igarashi: J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1989) 4600.
- 12) I. Harada and T. Tonegawa: J. Magn. Magn. Mater. **90&91** (1990) 234.

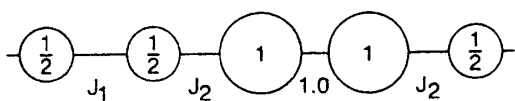


図 1

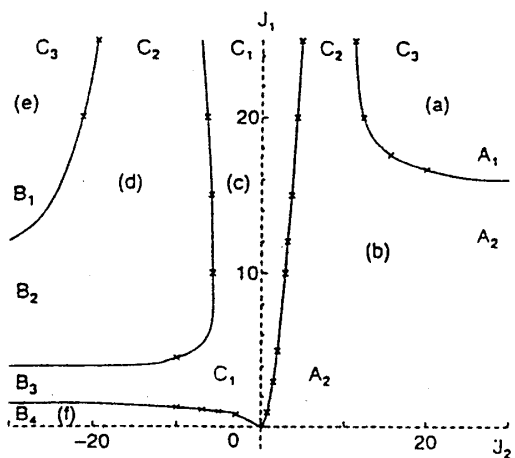


図 2

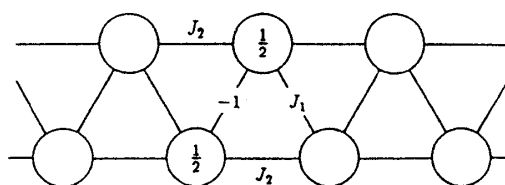


図 4

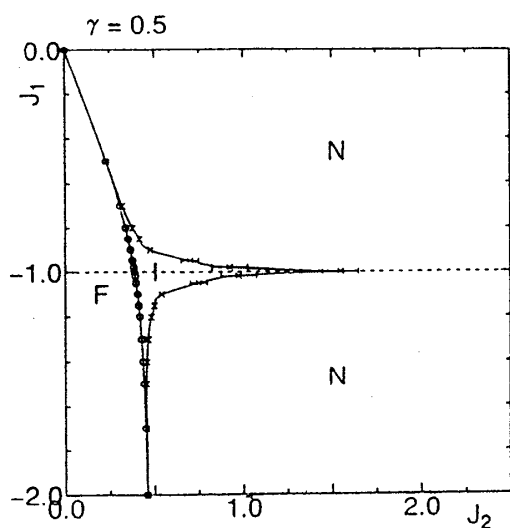


図 5 F は強磁性状態 ($M=N/2$), I は中間状態 ($N/2 > M > 0$), N は非磁性状態 ($M=0$) を表す。

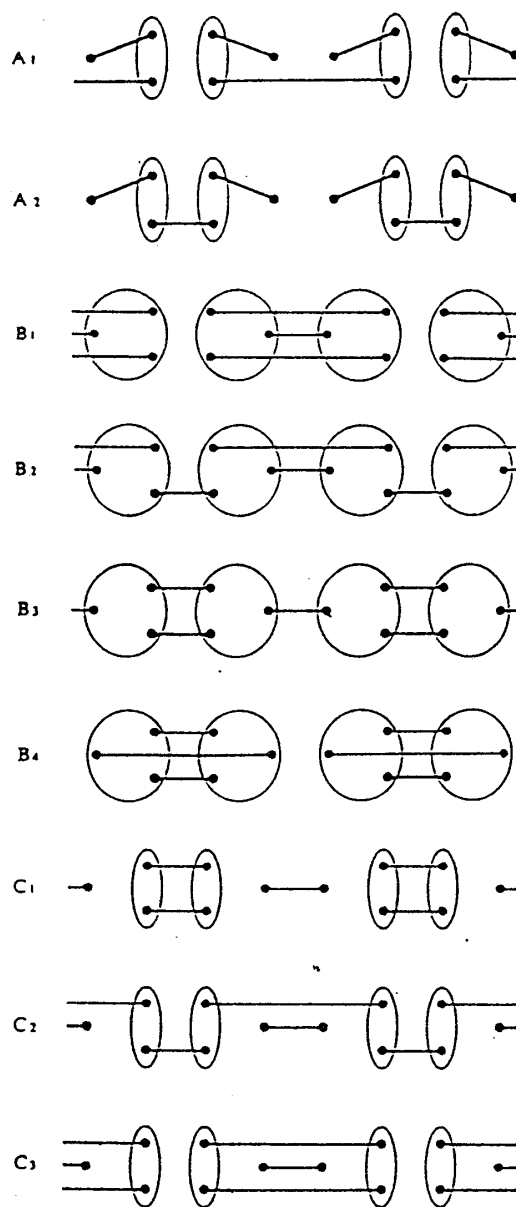


図 3 相図の各領域での基底状態相の VBS 表示. 黒丸は $S=1/2$ スピンを表し, 楕円及び円は, それぞれ, 囲まれている $S=1/2$ スピンが対称化されて, $S=1$ 及び $S=3/2$ となっていることを示す.