

交代ボンド・スピン鎖の基底状態相転移と現象論的摂動論

東大 理・羽田野 直道

近年、量子系における基底状態の相転移現象が注目を集めている。これは、基底状態における量子揺らぎが、有限温度相転移での温度揺らぎと同じ役割を担って引き起こす現象と理解されている。

さて、このような相転移を示す系に二つの調節可能なパラメータが含まれているとする。(以下で示す例にしたがって、このパラメータを λ と ε と書くことにする。) このとき、二次元のパラメータ空間上で相図が描かれることになる。言い換えれば、 ε を固定して λ を変化させた時の転移点 $\lambda_c(\varepsilon)$ が、 ε に依存して変化することが考えられる。同時に臨界指数も変化する可能性がある。

このような相図を数値計算で求めようとする時によく行なわれるのは、次のような方法である：「(1) ε をある値に固定して λ を変化させ、転移点 $\lambda_c(\varepsilon)$ を評価する、(2) 同じ手続きを別の ε についても繰り返す、(3) 求められた幾つかの $\{\lambda_c(\varepsilon)\}$ を滑らかに結ぶ。」ここではこれと全く異なったアプローチについて述べる [1]。すなわち、摂動論で得られた結果を現象論 (有限サイズ・スケーリング) で解析し、転移点と臨界指数の ε に関する微係数を求める、という方法である。

一般論を述べる前に、後半で具体的に計算するモデルをまず紹介する。

反強磁性 XXZ 鎖

$$\mathcal{H} = J_{AF} \sum_i \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \lambda S_i^z S_{i+1}^z \right) \quad (J_{AF} > 0) \quad (1)$$

は、注目を集めている低次元系の一つである。これは、Haldane が以下のような予言したことに始まる [2, 3]: 「(1) スピンが整数の場合、 λ のある領域 ($\lambda = 1$ を含む) で無秩序な基底状態が存在し、励起状態との間にエネルギー・ギャップがある、(2) スピンが半奇数の場合は $S = 1/2$ に対する厳密解と同じ振舞をする。」それ以前に知られていた $S = 1/2$ の場合の厳密解 [4] と $S = \infty$ の場合の厳密解 [5] では、いずれも $\lambda = 1$ で基底状態の相関長が無限大となる。このため、すべての S について同様の振舞をするものと思われていたこともあって、Haldane 予想は大きな驚きをもって迎えられた。しかし、数値計算、実験などの結果から、現在では正しいものと考えられている [6-8]。

整数スピンの場合には、 λ を変化させたときに $\lambda = \lambda_c(> 1)$ で基底状態相転移が起こるものと考えられる。すなわち、 $\lambda < \lambda_c$ では無秩序な基底状態がただ一つ存在し (Haldane 相)、 $\lambda > \lambda_c$ では Néel 秩序を持つ基底状態が二つ縮退している (Néel 相)。相境界上でのみ励起状態との間のギャップが消える。Néel 相へ入ると同時に、Néel 秩序変数が $\sim (\lambda - \lambda_c)^\beta$ の形で現れる。

飛田は、上の $S = 1$ のモデルの無秩序な基底状態が、次のような $S = 1/2$ の交代ボンド鎖の基底状態の極限として理解されることを示した [9, 10]:

$$\mathcal{H} = J_{AF} \mathcal{H}_{AF} + J_F \mathcal{H}_F \quad (J_{AF}, J_F \geq 0), \quad (2)$$

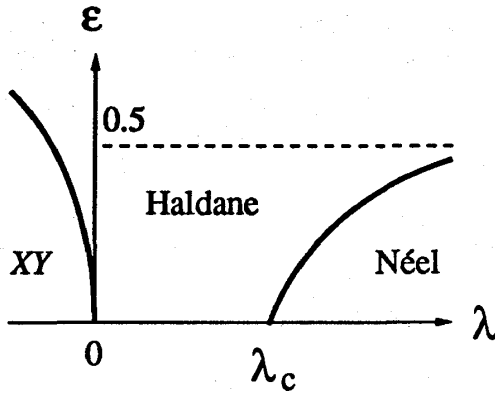


図 1: 模型 (2) の予想される基底状態相図。本研究では特に Haldane 相と Néel 相との相境界を議論する。

ただし,

$$\mathcal{H}_{AF} \equiv \sum_i (\tau_i^x \sigma_{i+1}^x + \tau_i^y \sigma_{i+1}^y + \lambda \tau_i^z \sigma_{i+1}^z) \quad \text{及び} \quad \mathcal{H}_F \equiv - \sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i. \quad (3)$$

ここで, $\{\vec{\sigma}_i\}$ と $\{\vec{\tau}_i\}$ は共にパウリ行列である。この模型は $J_F \rightarrow \infty$ で $S = 1$ の模型 (1) に帰着すると考えられる。

これを摂動論の立場から見ると, 次のようになる。模型 (2) の第二項 $\mathcal{H}_F$ を非摂動項, 第一項 $\mathcal{H}_{AF}$ を摂動項とみなし, 摂動パラメータを

$$\varepsilon \equiv J_{AF}/J_F \quad (4)$$

とする。非摂動系は基底状態が 3^L 重に縮退している。(ただし L はスピン対 $(\vec{\sigma}_i, \vec{\tau}_i)$ の数。) したがって, 基底状態の一次摂動を計算する前に, まず零次近似として 3^L 個の状態の適当な線形結合を選ばなければならない。この手続きがちょうど模型 (1) を対角化するのと等価である。模型 (1) の無秩序な基底状態は零次近似固有関数, そのエネルギーは一次近似エネルギーに等しい。

数値計算等から, 模型 (2) の $J_F = 0$ ($\varepsilon = \infty$) のときの基底状態 (一重項の直積) が, 連続的に $\varepsilon = 0$ の基底状態につながっていると考えられている [9, 10]。更に, $\varepsilon < 1/2$ では, 模型 (1) と同様に $\lambda = \lambda_c(\varepsilon)$ において Haldane 相から Néel 相への転移を起こすと予想されている [11-13]。ただし, この時の秩序変数は, 通常の Néel 秩序変数に代えて

$$s_z \equiv \frac{1}{2L} \sum_i (-1)^i (\sigma_i^z + \tau_i^z) \quad (5)$$

である。この基底状態相転移の (λ, ε) に関する相図が, 図 1 のように予想されている。相境界 $\lambda_c(\varepsilon)$ は数値計算で調べられているが, これまでは主に $\varepsilon \simeq 1/2$ の近傍で議論されてきた [12, 13]。ここでは, 逆に $\varepsilon \sim 0$ の近傍における微係数

$$\lambda'_c \equiv d\lambda_c/d\varepsilon|_{\varepsilon=0} \quad \text{及び} \quad \nu' \equiv d\nu/d\varepsilon|_{\varepsilon=0} \quad (6)$$

を求める。

さて, 以下に現象論的摂動論の一般論を述べる。

本質的な部分は既に鈴木によって提案され [14], 最近になって古典系の温度相転移の解析に応用された [15]。ただし, これらは熱力学的極限における現象論を用いていた。しかし上の問題のように, 量子系を数値的に議論しようとする場合, 扱える系の大きさは非常に限られている。したがって, ここでは有限サイズ・スケーリングを基にして一般論を展開する。

まず, ある物理量 Q に対して次の有限サイズ・スケーリング形を仮定する [16]:

$$\langle Q \rangle_{\lambda, L} = L^{\omega} \tilde{Q}(y) \quad (y \equiv L/\xi). \quad (7)$$

ここで, 式 (7) の左辺は異方性 λ , 大きさ L の系における基底状態での Q の期待値である。指数 ω は演算子 Q のスケーリング次元を, $\tilde{Q}$ はスケーリング関数を, ξ は相関長を表す。相関長は臨界点 λ_c 近傍で

$$1/\xi \sim (\lambda_c - \lambda)^{\nu} \quad (8)$$

のように振舞う。(ただし Kosterlitz-Thouless 転移の場合を除く。) 式 (7)-(8) より, 熱力学極限における Q の振舞が $\langle Q \rangle_{\lambda, \infty} \sim (\lambda_c - \lambda)^{-\omega\nu}$ と得られる。

ここで摂動 ε を変化させると, 臨界点 λ_c , 臨界指数 ν とスケーリング関数 $\tilde{Q}$ が変化する可能性がある。なお「弱いユニヴァーサリティ」[17]により, スケーリング次元 ω は ε に依らないものとする。

スケーリング形 (7) を摂動パラメータ ε に関して微分すると,

$$X(\lambda, \varepsilon; L) \equiv \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \log \langle Q \rangle_{\lambda, L} = ya(y) \left\{ \frac{\nu'}{\nu} (\log y - \log L) + \nu \lambda'_c \left(\frac{L}{y} \right)^{1/\nu} \right\} + b(y) \quad (9)$$

なる式が得られる。ここで $a(y) \equiv \tilde{Q}^{-1} \partial \tilde{Q} / \partial y$ 及び $b(y) \equiv \tilde{Q}^{-1} \partial \tilde{Q} / \partial \varepsilon$ と定義されている。式 (9) の対数関数の項は $\lambda = \lambda_c$ つまり $y = 0$ でゼロになるので, $L^{1/\nu}$ 依存性の項の係数を調べれば λ'_c がわかる。表式を簡単にするため, $\varepsilon = 0$ における転移では $\nu = 1$ であるとする,

$$X(\lambda_c, 0; L) = a(0) \lambda'_c L + b(0) \quad (10)$$

となる。一方で, 式 (7) を λ に関して微分すると

$$Y(\lambda, 0; L) \equiv \frac{\partial}{\partial \lambda} \log \langle Q \rangle_{\lambda, L} = -ya(y) \nu \left(\frac{L}{y} \right)^{1/\nu} \quad (11)$$

となる。再び $\nu = 1$ を仮定すると

$$Y(\lambda_c, 0; L) = -a(0) L \quad (12)$$

となる。以上の2式 (10) と (12) の左辺の量は, 摂動論を用いて微視的に計算できる。それらの L の比例係数を比較して λ'_c を評価することができる。

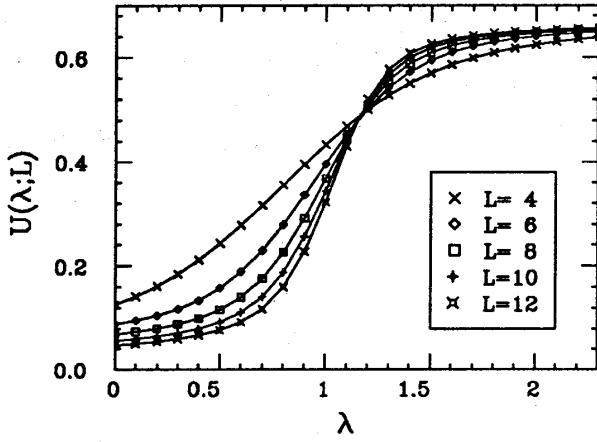


図 2: Binder パラメータ (14) の λ 依存性。曲線の交点が転移点 λ_c を与える。(なお、評価値 (15) と (16) を得るにあたっては、大きさ $8 \leq L \leq 16$ の系に対するより緻密なデータを用いたが、ここにはプロットしていない。)

臨界点の微係数 λ'_c が評価できると、臨界指数の微係数 ν' は次の式を使って評価できる。すなわち、 y を一定にして

$$X(\lambda, 0; L) + \lambda'_c Y(\lambda, 0; L) = ya(y) \frac{\nu'}{\nu} (\log y - \log L) + b(y) \quad (13)$$

という量を調べると、その $\log L$ の依存性から $a(y)\nu'/\nu$ が得られる。係数 $a(y)$ は式 (11) からわかるので、 ν'/ν を評価できることになる。

さて、上の一般論を模型 (2) の Haldane-Néel 相転移に適用した結果を以下に報告する。扱った系の大きさは最大で $L = 16$ である。行列の対角化や逆行列の計算には Lanczos 法を用いた [18, 19]。

まず、 $\varepsilon = 0$ における転移点を求めるために Binder パラメータ解析を行った [20, 21]。つまり、模型 (1) の基底状態で、無次元量

$$U(\lambda; L) \equiv 1 - \frac{\langle s_z^4 \rangle_{\lambda, L}}{3 \langle s_z^2 \rangle_{\lambda, L}^2} \simeq \tilde{U}(L/\xi) \quad (14)$$

を計算した。なお、 s_z は Néel 秩序変数、又は式 (5) で定義される量である。式 (14) は臨界点において L 依存性を失うと期待されるので、図 2 における $\{U(\lambda; L)\}$ の交点が転移点の評価 $\lambda_c \simeq 1.15$ を与える。更にスケーリングに対する主要な補正項 [22] を取り入れた解析から、最終的に

$$\lambda_c = 1.192(4) \quad (15)$$

を得た。この値は [23] で得られているものとよく一致している。臨界点における Binder パラメータ (14) の値

$$\tilde{U}(0) = 0.544(4) \quad (16)$$

は、二次元イジング模型における評価 [20, 21] と符合する。

次に、上で求めた転移点における臨界指数 ν を計算した。これには、

$$\left. \frac{\partial \log \langle s_z^n \rangle_{\lambda, L}}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=\lambda_c} \propto L^{1/\nu} \quad (n=2 \text{ および } n=4) \quad (17)$$

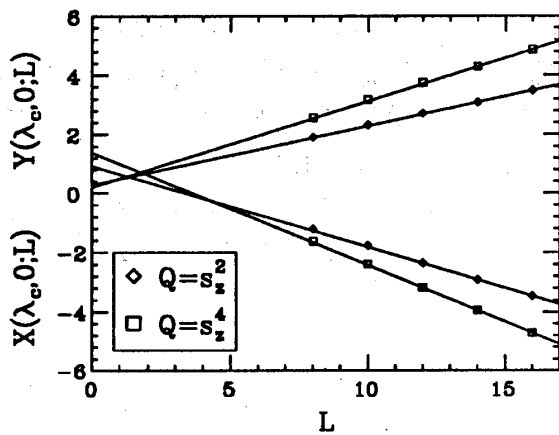


図 3: 式 (10) (下半分) と式 (12) (上半分) の L 依存性。直線は $L = 14$ と $L = 16$ のデータ点を結んだもの。二つの量 X と Y の傾きの比が λ'_c にあたる。

のデータを用いた。スケーリングに対する補正項も含めた解析から

$$1/\nu = 0.97(3) \quad (18)$$

が得られた。また、 $\langle s_z^2 \rangle_{\lambda_c, L}$ と $\langle s_z^4 \rangle_{\lambda_c, L}$ の解析から $\beta/\nu = 0.13(1)$ が得られた。

以上の結果から、この転移が二次元イジング模型のユニヴァーサリティー・クラスのものであることが改めて確認された [23, 24, 25]。以下の解析では ν の値は (18) を使わずに 1 に固定しておくことにする。

第三に、 $Q = s_z^2$ および $Q = s_z^4$ として (10) と (12) を計算した (図 3)。図の L 依存性の係数から $a(0)\lambda'_c$ と $a(0)$ を評価した結果、

$$\lambda'_c \simeq 1.40(4) \quad (19)$$

を得た。現在の所、この結果と比較できるような $\varepsilon \sim 0$ での研究は見当たらない。一方、先にふれたように $\varepsilon \rightarrow 1/2$ では相境界 $\lambda_c(\varepsilon)$ が正の無限大へ向かうことが示されている [11, 12]。これを評価値 (19) と組み合わせると、次のような「実験式」が得られる：

$$\lambda_c \simeq 1.192 + \frac{1.40\varepsilon}{1-2\varepsilon} + O(\varepsilon^2) \quad (20)$$

最後に、式 (13) のデータの $\log L$ 依存性を調べた (図 4)。図の曲線は $L \rightarrow \infty$ にしたがって定数になるように見える。これは $\nu' = 0$ 、つまり Haldane-Néel 相境界上でのユニヴァーサリティーを示唆するものである。(なお、スケーリングに対する補正のため ν' の定量的な評価には至らなかった。) これとは別に $\varepsilon \simeq 1/2$ 付近におけるユニヴァーサリティーも数値的に示されている [12]。ここでの結果はそれと相補的なものといえる。

まとめると、ここでは量子系の基底状態相転移に関する摂動計算の現象論的解析法を定式化した。これにより、相境界に沿った臨界点と臨界指数の変化を数値的に議論できる。この一般論を、特に交代ボンド・スピン鎖の Haldane-Néel 相転移に適用し、 λ'_c と ν' を評価した。

数値計算は、文部省科学研究費補助金：重点領域研究「計算物理学 — 物性研究における新展開」に基づいて行なわれた。

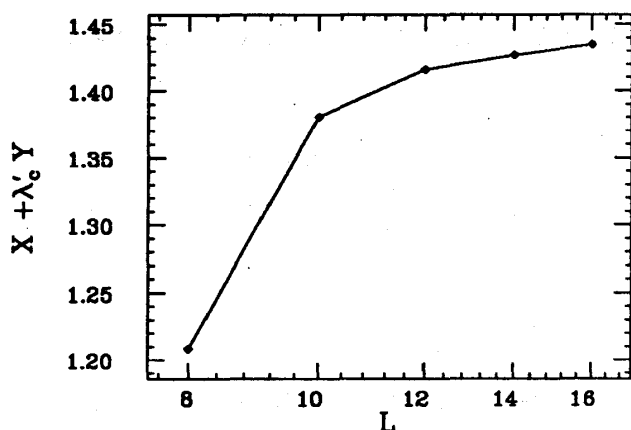


図 4: 式 (13) の L 依存性の片対数プロット。ただし、物理量は $Q = s_z^2$ とし、スケーリング変数は $y = 0.1$ に固定してある。

参考文献

- [1] N. Hatano, Phenomenological perturbation theory of quantum ground-state phase transitions, submitted to Phys. Lett. A.
- [2] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1153.
- [3] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. A **93** (1983) 464.
- [4] H. A. Bethe, Z. Phys. **71** (1931) 205.
- [5] M. E. Fisher, Am. J. Phys. **32** (1964) 343.
- [6] M. Kolb, R. Botet, and R. Jullien, J. Phys. A: Math. Gen. **16** (1983) L673.
- [7] N. Hatano and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 1346.
- [8] W. J. L. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach and K. Hirakawa, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 371.
- [9] K. Hida, Phys. Rev. B **45** (1992) 2207.
- [10] K. Hida, Phys. Rev. B **46** (1992) 8268.
- [11] M. Kohmoto and H. Tasaki, Phys. Rev. B **46** (1992) 3486.
- [12] M. Yamanaka, Y. Hatsugai and M. Kohmoto, Phys. Rev. B (1993).
- [13] K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 1463.
- [14] M. Suzuki, Phys. Rev. Lett. **28** (1972) 507.
- [15] K. Minami and M. Suzuki, Phys. Lett. A **180** (1993) 179.
- [16] M. N. Barber, in: Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 8, eds. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1983).
- [17] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **51** (1974) 1992.
- [18] C. Lanczos, J. Res. Nat. Bur. Standards, **45** (1950) 255.
- [19] C. C. Paige and M. A. Saunders, SIAM J. Numer. Anal. **12** (1975) 617.
- [20] K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47** (1981) 693.
- [21] K. Binder, Z. Phys. B – Condensed Matter **43** (1981) 119.
- [22] M. Barma and M. F. Fisher, Phys. Rev. B **31** (1985) 5954.
- [23] T. Sakai and M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 2688.
- [24] G. Gómez-Santos, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 790.
- [25] K. Nomura, Phys. Rev. B **40** (1989) 9142.