

第2近接相互作用を含む1次元量子ハイゼンベルグ模型——有限系の計算

神戸大理 利根川 孝, 原田 勲

競合する相互作用をもつ量子スピン系におけるフラストレーションの効果を理論的に調べる研究が、盛んになりつつある。最近、小口・西森・田口¹⁾は、有限な大きさの3角格子上の最近接反強磁性ハイゼンベルグ模型(スピンの大きさ S は $1/2$)に対するハミルトニアンを対角化して得られる結果を無限系に外挿する方法を用いて、この模型の基底状態の性質を詳しく調べている。本研究の目的は、同様な方法を用いて、共に反強磁性的な最近接および第2近接相互作用を含む1次元格子上のハイゼンベルグ模型($S=1/2$)の基底状態の性質を調べることにある。

周期的境界条件を仮定して、考えるハミルトニアンを次の形に書く：

$$H = 2J_1 \sum_{l=1}^N \{S_l^x S_{l+1}^x + S_l^y S_{l+1}^y + \delta_1 S_l^z S_{l+1}^z\} + 2J_2 \sum_{l=1}^N \{S_l^x S_{l+2}^x + S_l^y S_{l+2}^y + \delta_2 S_l^z S_{l+2}^z\}. \quad (1)$$

ここで、右辺第1項および第2項はそれぞれ最近接相互作用および第2近接相互作用を表し、 $J_1(>0)$, $J_2(\geq 0)$ は相互作用定数、 $\delta_1(\geq 0)$, $\delta_2(\geq 0)$ は相互作用の異方性を表すパラメーターである。また、 N はスピン数を表し、その値は偶数であるとする。

有限系に対する数値計算を議論する前に、無限系($N \rightarrow \infty$)の基底状態に対して、これまでに解析的に求められている結果について簡単に述べる。まず、1スピン当りの基底状態のエネルギー ε_g は、 $J_2=0$ の場合に計算されている。^{2),3)} (特に、 $\delta_1=1$ の場合には、 $\varepsilon_g = J_1(\frac{1}{2} - 2 \log 2)$ となり、⁴⁾ $\delta_1=0$ の場合には、 $\varepsilon_g = -2J_1/\pi$ となる。^{5),6)} また、 $J_2=\delta_1=0$ の場合に対しては、スピン対相関関数 $\omega_n^\lambda = \langle \psi_g | S_l^\lambda S_{l+n}^\lambda | \psi_g \rangle$ (ψ_g は基底状態の固有関数； $\lambda=x, y, z$)も計算されている。^{5),7)} さらに、 $J_2/J_1=1/2$, $\delta_1=\delta_2$ の場合、基底状態は2重に縮退しており、それら2つの基底状態の固有関数 ψ_g^+ , ψ_g^- および ε_g は次のように与えられる⁸⁾：

$$\psi_g^\pm = (\phi_1 \pm \phi_2)/\sqrt{2}, \quad (2)$$

$$\phi_1 = [1, 2][3, 4] \cdots [N-3, N-2][N-1, N], \quad (3)$$

$$\phi_2 = [2, 3][4, 5] \cdots [N-2, N-1][N, 1], \quad (4)$$

$$\varepsilon_g = -(2 + \delta_1)J_1/4. \quad (5)$$

ただし、(3), (4)式において、 $[l, l+1] = (\alpha_l \beta_{l+1} - \beta_l \alpha_{l+1})/\sqrt{2}$ (ここで、 α, β はそれぞれ上向きおよび下向きのスピン状態を表す固有関数)である。(2)式の固有関数より、スピン対相関関数が λ によらず $\omega_n^\lambda = -1/8$, $\omega_n^\lambda = 0$ ($n \geq 2$)と求められる。⁸⁾

さて、全スピンの z 成分 $S_{\text{tot}}^z = \sum_l S_l^z$ は(1)式のハミルトニアン H と交換する。従って、 H の固有状態は S_{tot}^z の固有値 $M (= 0, 1, \dots, N/2)$ で分類でき、 M の各々の値に対して対角化すべきマトリックスの次元は $N!/(\frac{N}{2}+M)!(\frac{N}{2}-M)!$ となる。我々は、 $N=6, 8, 10, 12, 14, 16, 18$ なる N の値に対するこれらのマトリックスの最低固有値およびそれに

対応する固有関数を, *coordinate relaxation* 法⁹⁾を用いて計算した。さらに, それらの固有値および固有関数を用いて, 有限系に対する種々の物理量を計算し, その結果を無限系に外挿することを試みた。以下に, 得られた結果のいくつかをまとめる。

(1) 基底状態のエネルギー

基底状態は $M=0$ の部分空間に属している。 $0 \leq J_2/J_1 \leq 1/2$ の時には, 有限系での 1 スピン当りの基底状態のエネルギー $\varepsilon_g(N)$ を N^{-1} についての 2 次式: $\varepsilon_g(N) = \varepsilon_g + aN^{-1} + bN^{-2}$ で表し, $N=14, 16, 18$ に対する $\varepsilon_g(N)$ の値を用いて, ε_g を定める。このようにして定められた ε_g の値の相対誤差は, $\pm 0.01\%$ 程度である。一方, $J_2/J_1 > 1/2$ の時には, $\varepsilon_g(N)$ の N 依存性が複雑であるため, $N \rightarrow \infty$ への外挿は簡単ではないが, それでも $N=18$ までの結果を用いると, $\pm 0.2\%$ 程度の相対誤差で, ε_g の値を定めることができる。 $\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合および $\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合の ε_g に対する結果を, それぞれ図 1 および図 2 に示す。前者の場合に対しては, 以前に小野¹⁰⁾が $N=12$ までの計算を行って ε_g を求めているが, 我々の結果は彼の結果を再現している。

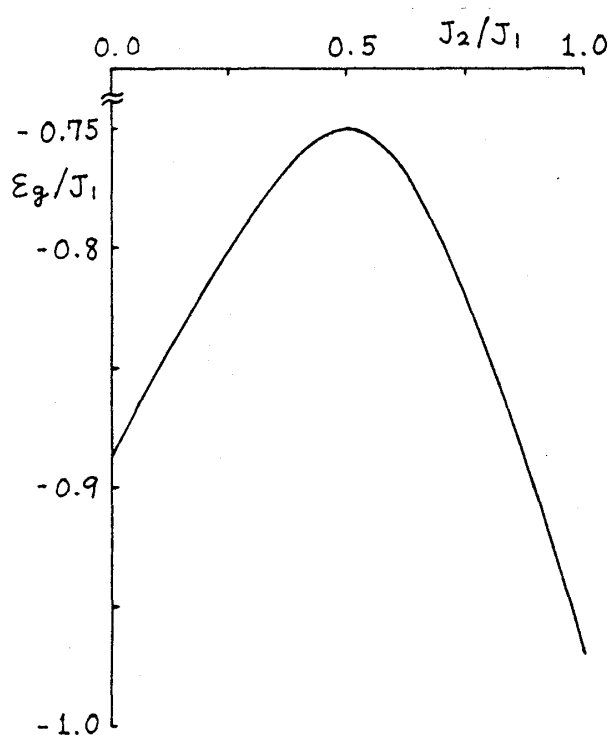


図 1. ε_g の J_2/J_1 依存性 ($\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合).

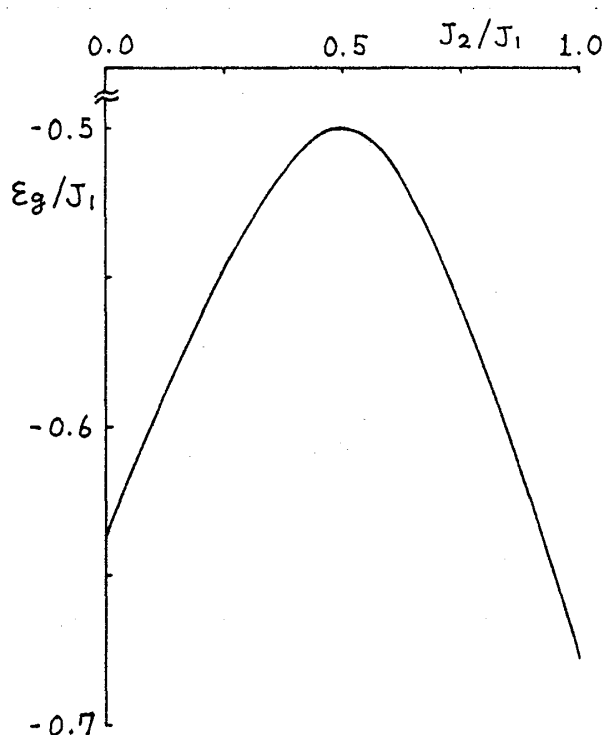


図 2. ε_g の J_2/J_1 依存性 ($\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合).

(2) singlet-triplet energy gap

$M=1$ の部分空間に属する固有状態がとるエネルギー固有値の最低値 $E_1(N)$ と基底状態のエネルギー固有値 $E_g(N) [= N\varepsilon_g(N)]$ との差 $\Delta(N) [= E_1(N) - E_g(N)]$ を $N \rightarrow \infty$ に外挿することにより, 無限系での singlet-triplet energy gap Δ を求めることがで

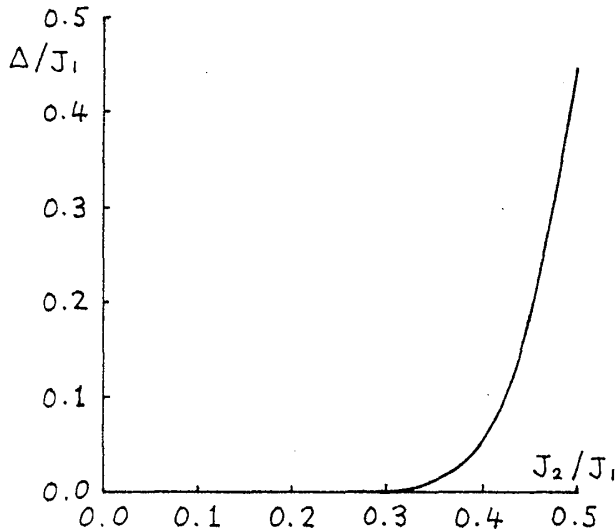


図 3. Δ の J_2/J_1 依存性 ($\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合).

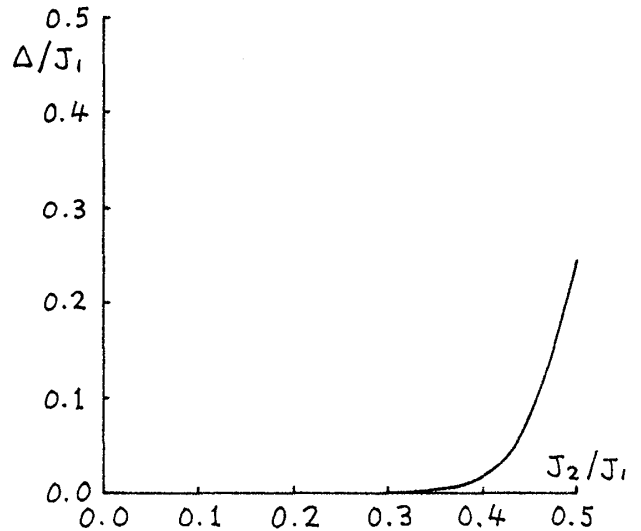


図 4. Δ の J_2/J_1 依存性 ($\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合).

きる. $\varepsilon_g(N)$ の場合と同様に, $0 \leq J_2/J_1 \leq 1/2$ の時には, $\Delta(N) = \Delta + cN^{-1} + dN^{-2}$ と表し, $N = 14, 16, 18$ に対する $\Delta(N)$ の値を用いて, Δ を定める. この場合, Δ/J_1 に対する誤差は, 絶対誤差で ± 0.005 以下である. $\delta_1 = \delta_2 = 1$ および $\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合の Δ の J_2/J_1 依存性を, それぞれ図 3 および図 4 に示す. $J_2 = 0$, $0 \leq \delta_1 \leq 1$ の時に $\Delta = 0$ であることは, すでに知られている.^{11), 12)} 図 3 から分かるように, $\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合, J_2/J_1 が有限になっても, その値が小さい間は $\Delta = 0$ であるが, $J_2/J_1 \geq 0.3$ で Δ は有限になる. このような Δ の振舞いは, $\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合も定性的には変わらない (図 4 参照).

(3) スピン対相関関数

スピン対相関関数のフーリエ変換を, $\mathcal{S}^\lambda(q) = \sum_n \omega_n^\lambda \exp(iqn)$ で定義する. 有限系に対しては, 波数 q は $q = 0, \pm 2\pi/N, \dots, \pm(N-2)\pi/N, \pi$ なる有限個の値のみをとることができる. 有限系での $\mathcal{S}^\lambda(q)$ の最大値を与える q の値を $q_0^\lambda(N)$ で表す. $\delta_1 = \delta_2 = 1$ で $N = 8, 12, 16$ の場合の $q_0^\lambda(N)$ の J_2/J_1 依存性を, 図 5 に点線で示す. これらの結果より, 無限系での $\mathcal{S}^\lambda(q)$ の最大

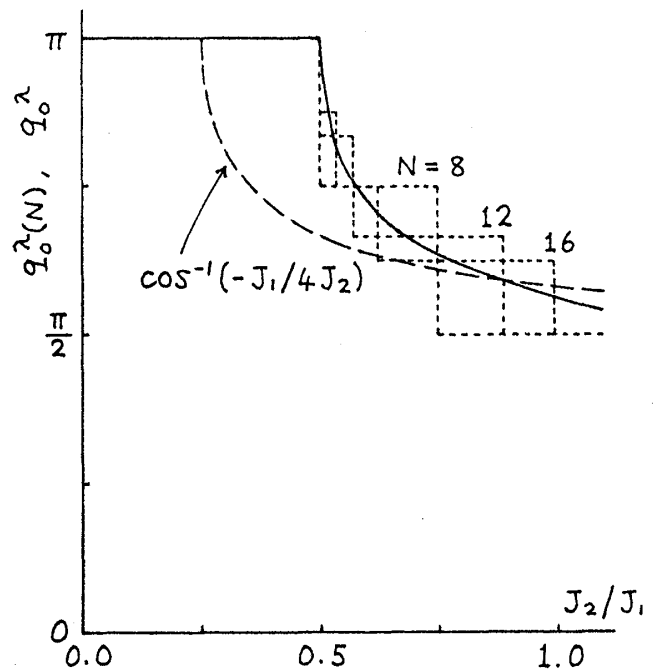


図 5. $q_0^\lambda(N)$, q_0^λ ($\lambda = x, y, z$) の J_2/J_1 依存性 ($\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合).

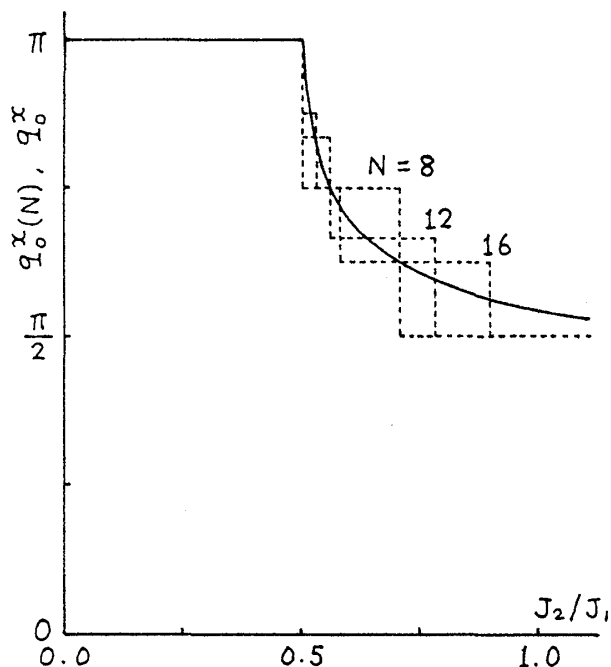


図 6. $q_0^x(N) [= q_0^x(N)]$, $q_0^x [= q_0^x]$ の J_2/J_1 依存性 ($\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合).

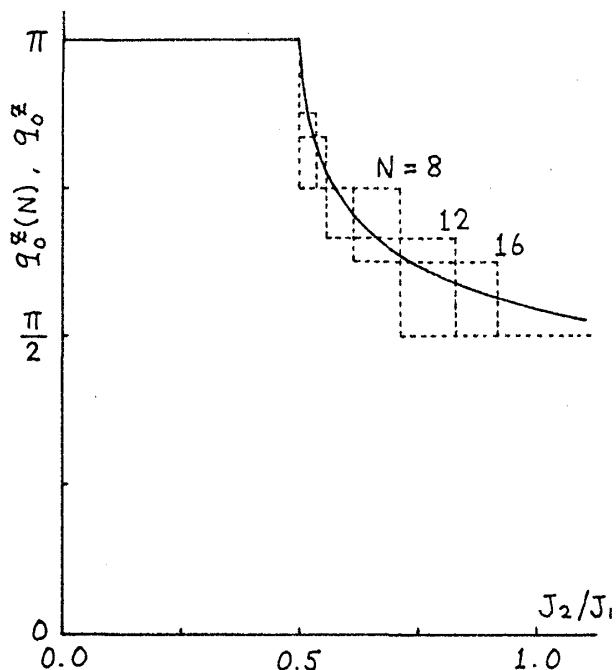


図 7. $q_0^z(N)$, q_0^z の J_2/J_1 依存性 ($\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合).

値を与える q の値 q_0^z は, $\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合勿論入に依らず, 図 5 に実線で示されているような J_2/J_1 依存性をもつと予想される. 図 6, 図 7 は, $\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合の対応する結果を示している. いずれの場合も, q_0^z の値は $0 \leq J_1/J_2 \leq 1/2$ の時 π であり, J_2/J_1 が $1/2$ を越えて大きくなるにつれて, $\pi/2$ に近づく. 一方, 等方的な古典ハイゼンベルグスピン系では, q_0^z は入に依らず, $0 \leq J_2/J_1 \leq 1/4$ で $q_0^z = \pi$, $J_2/J_1 \geq 1/4$ で $q_0^z = \cos^{-1}(-J_1/4J_2)$ であり (図 5 の破線参照), また, イジングスピン系では, $0 \leq J_2/J_1 \leq 1/2$ で $q_0 = \pi$, $J_2/J_1 \geq 1/2$ で $q_0 = \pi/2$ である.

(4) 磁化曲線

(1) 式にゼーマン項 $-g\mu H \sum_i S_i^z$ を加えたハミルトニアンで記述される系を考える. ここで, g は g 因子, μ はボーア磁子, H は z 方向にかけられた磁場の大きさである. 有限系の基底状態における 1 スピン当りの磁化 $m(N)$ は, H とともにステップ状に増加する. $J_2/J_1 = 1/2$, $\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合で, $N=18$ の時の $m(N)$ の H による変化の様子を, 図 8 に点線で示す. 図 8 の $\circ$ 印はその点線の各ステップの水平および垂直部分の中点を示しており, また, $+$, $\times$, $\square$, $\triangle$ の各印はそれぞれ $N=16, 14, 12, 10$ の時の対応する点を示している. Bonner・Fisher⁽¹³⁾ は, $J_2=0$, $\delta_1=1$ の場合に, このような中点を滑らかに結ぶことにより, 無限系の基底状態における 1 スピン当りの磁化 m の H 依存性を導いたが, その結果は Griffiths⁽¹⁴⁾ による厳密な結果を定量的にかなりよく再現している. 我々の計算結果

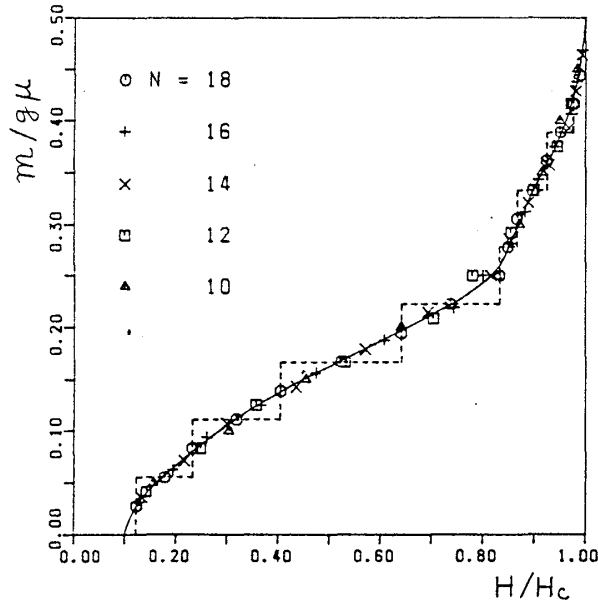


図 8. $J_2/J_1 = 1/2$, $\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合の磁化曲線.

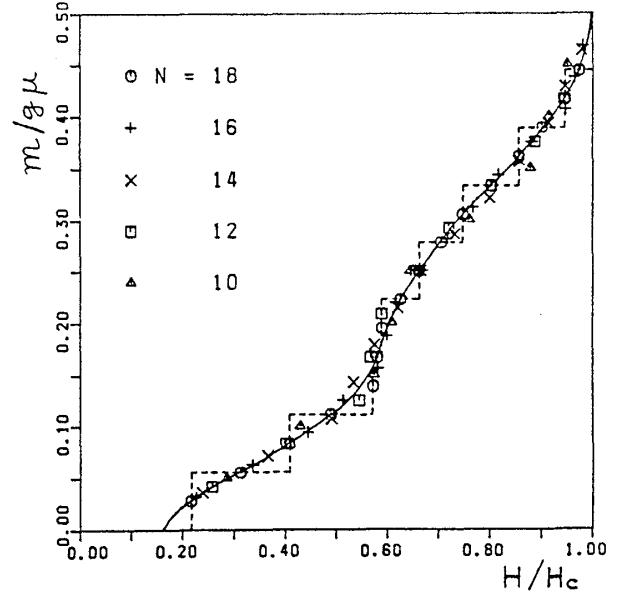


図 9. $J_2/J_1 = 1/2$, $\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合の磁化曲線.

によれば, $J_2 = 0$, $\delta_1 = 0$ の場合に同様な方法で得られる m の H 依存性も, 桂⁶⁾による厳密な結果を定量的にかなりよく再現する。図 8 の実線は, 上で述べた $J_2/J_1 = 1/2$, $\delta_1 = \delta_2 = 1$ の場合の中点をできるだけ滑らかに結ぶことによって得られる m の H 依存性を示している。図 9 には, 図 8 に対応する $J_2/J_1 = 1/2$, $\delta_1 = \delta_2 = 0$ の場合の結果が示されている。 H の値を 0 から増していく時, m の値が有限になる H の値は $H = \Delta/g\mu$ (Δ は (2) で議論した *singlet-triplet energy gap*) で与えられ, また, m の値が最大 (最大値は $g\mu/2$) になる H の値 H_c は, $0 \leq J_2/J_1 \leq 1/4$ の時 $H_c = 2J_1(1+\delta_1) - 2J_2(1-\delta_2)$ で, $J_2/J_1 \geq 1/4$ の時 $H_c = 2J_1\delta_1 + 2J_2(1+\delta_2) + (J_1^2/4J_2)$ で与えられる ($H \geq H_c$ で $m = g\mu/2$)。 $J_2 = 0$ の場合に比べて, 中点の位置のばらつきが大きいため, J_2 が有限である場合の m の値を H の全領域にわたって定量的に正確に決めることは難しいが, 上記の方法を用いると, J_2 が有限な場合でも, かなりの精度で m の H 依存性を知ることができる。

最後に, *coordinate relaxation* 法のプログラムを快くお貸し下さった分子科学研究所の滝本淳一氏に, 厚くお礼申し上げる。

参考文献

- 1) T. Oguchi, H. Nishimori and Y. Taguchi: J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 323.
- 2) R. Orbach: Phys. Rev. 112 (1958) 309.
- 3) C. N. Yang and C. P. Yang: Phys. Rev. 150 (1966) 327.
- 4) L. Hulthén: Arkiv Mat. Astron. Fysik 26A (1938) 1.
- 5) E. Lieb, T. Schultz and D. Mattis: Ann. Phys. 16 (1961) 407.

研究会報告

- 6) S. Katsura : Phys. Rev. 127 (1962) 1508.
- 7) T. Tonegawa : Solid State Commun. 40 (1981) 983.
- 8) C. K. Majumdar : J. Phys. C 3 (1970) 911.
- 9) I. Skavitt, C. F. Bender, A. Pipano and R. P. Hosteny : J. Comput. Phys. 11 (1973) 90.
- 10) I. Ono : Phys. Lett. 38A (1972) 327.
- 11) J. des Cloizeaux and J. J. Pearson : Phys. Rev. 128 (1962) 2131.
- 12) J. des Cloizeaux and M. Gaudin : J. Math. Phys. 7 (1966) 1384.
- 13) J. C. Bonner and M. E. Fisher : Phys. Rev. 135 (1964) A640.
- 14) R. B. Griffiths : Phys. Rev. 133 (1964) A768.