

23. 2次元量子スピン系の数値的研究

東北大理 岡部 豊
阪大理 菊池 誠

§ 1. はじめに

酸化物高温超伝導体の発見は、量子スピン系の研究にも新しい興味を呼び起こした。 La_2CuO_4 などの、正孔のドーピングされていない酸化物の CuO_2 平面上の Cu^{2+} は、正方格子上のスピン $1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルでよく記述される。Anderson¹⁾が、このモデルの基底状態がネール状態でなく、スピン—重項の重ね合わせで表されるresonating valence bond (RVB) 状態であり、さらに、高温超伝導のメカニズムの本質であると主張して以来、数多くの研究がなされてきた。実験的にも、中性子散乱により、量子スピン流体的なふるまいが報告され、いろいろな磁気的性質が調べられている。

スピン $1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルの問題点は、次のようになるだろう。まず、基底状態について、基底状態エネルギーの値はどうなるか、状態は、ネールのか、RVBのか、それと密接に関連して基底状態で長距離秩序が存在するかということなどが、問題とされている。励起に関しては、ボーズ粒子的なスピン波か、中性フェルミ粒子的なスピノンか、ということが問われてきた。その結果、系の熱力学的性質やダイナミクスがどうなるかも興味がある。

ここ1年、スピン波理論、イジングモデルからの摂動論、実空間くりこみ群、RVB関連理論などの近似理論、少数系の厳密対角化、変分法、モンテカルロ法などの数値的方法により、多くの研究がなされ、モデルに関する理解がかなり進んだが、最も重要な基底状態および励起の性格に関して、確固たる結論には至っていないといえる。

§ 2. 数値的手法による研究

ここでは、我々の数値的手法による正方格子上のスピン $1/2$ 量子スピン系の研究^{2,3)}を紹介する。モデルとしては、XXZモデルと言われる一般化されたハイゼンベルグモデルを扱う。ハミルトニアンは、

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z), \quad J > 0$$

で与えられる。 $\Delta = 0$ はXYモデル、 $\Delta = 1$ は強磁性ハイゼンベルグモデルであり、 $\Delta = -1$ は正方格子のような2つの副格子に分けられる格子の場合は反強磁性ハイゼンベルグモデルに対応する。反強磁性ハイゼンベルグモデルを中心として、非等方パラメータ Δ に関して統一的な描像を得ることを目指す。

数値的な研究手段として、次の3つの方法を用いる。

- (i) 鈴木トロツタ量子モンテカルロ法
- (ii) 射影モンテカルロ法
- (iii) 少数系の厳密対角化

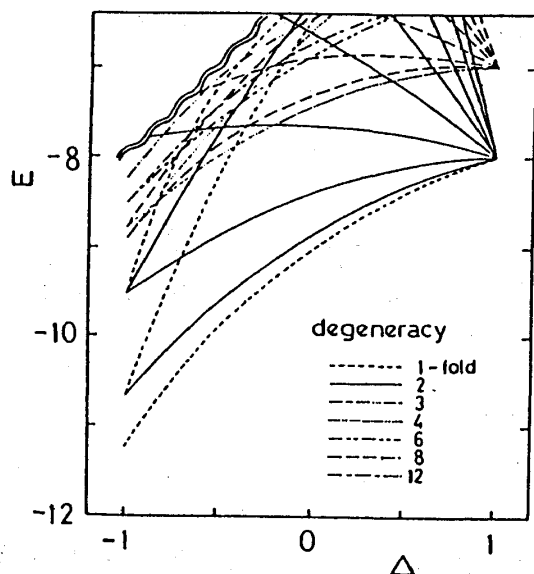
(i)、(ii)はいずれもモンテカルロ法であるが、それぞれ有限温度、絶対零度の物理量を計算する。(iii)のハミルトニアンの対角化の方法は、すべての固有値(固有ベクトル)を求めれば、すべての温度領域での熱力学的性質が精密に調べられるが、扱えるサイズは限られる。(i)の鈴木トロツタ量子モンテカルロ法で取り扱う系は、 16×16 までで、(iii)の対角化は、 4×4 の系を扱う。このように、それぞれの方法はたがいに相補的である。(ii)の方法の計算結果はまだ十分に得られていないので、(i)と(iii)の方法についてのみ報告する。

§ 3. 計算結果

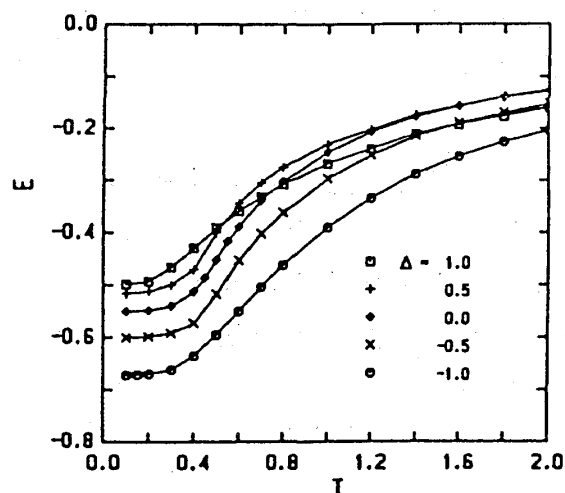
3. 1 エネルギー

ハミルトニアンの厳密対角化により得られた 4×4 の系のエネルギーレベルを Δ の関数として($-1 \leq \Delta \leq 1$)プロットしたのが、第1図であり、 $J=1$ の単位を用いる。線の種類により縮退の数を区別してある。このパラメータの範囲ではレベルの交差はなく基底状態の対称性は変化しない。基底状態と第一励起状態の間のギャップは、熱力学的極限では消失すると期待される。

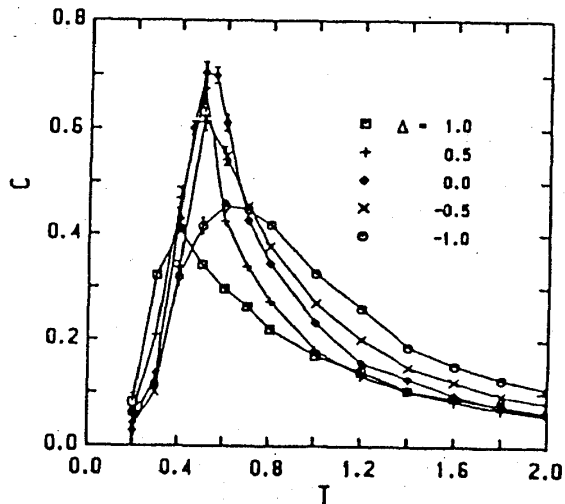
第2図に $\Delta = 0, \pm 0.5, \pm 1$ の場合の1スピンあたりのエネルギーの温度依存性のモンテカルロ法の結果を示す。系の大きさは 12×12 であり、 Δ に関



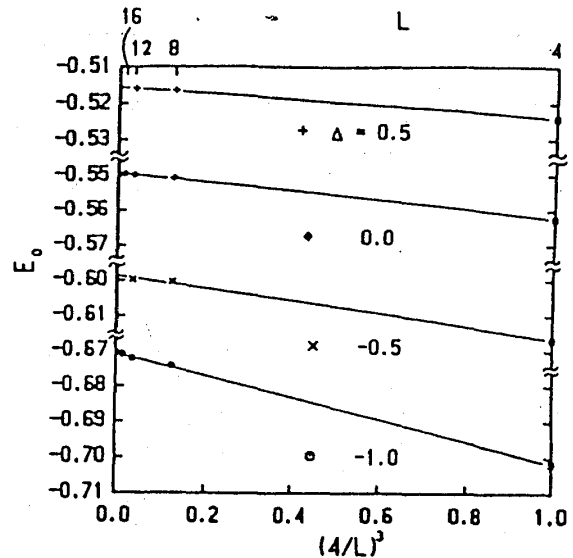
第1図 量子XXZモデルのエネルギーレベル
(4×4 の厳密対角化)。



第2図 量子XXZモデルの1スピンあたりの
エネルギーの温度依存性(12×12)。



第3図 量子XXZモデルの比熱の温度依存性
(12×12)。



第4図 基底状態エネルギーのサイズ依存性。

してエネルギーが系統的に変化することがわかる。 Δ の絶対値の等しい反強磁性系のエネルギーが、強磁性系のエネルギーより低いのは量子効果の現れである。

比熱の温度依存性を第3図に示す。 12×12 のサイズの結果である。XYモデル($\Delta = 0$)、および、 $\Delta = \pm 0.5$ では、 $T \sim 0.5$ で急なピークをもつが、このサイズ依存性から相転移が Kosterlitz-Thouless 転移的であるかどうかを論じることでもある。

次に有限温度のデータを $T = 0$ に外挿して基底状態エネルギー E_0 を求める。さらにサイズ依存性より無限系の値を評価しよう。ここでは、Barnes & Swanson⁴⁾ に従い、 L^{-3} に対して E_0 のサイズ依存性を第4図にプロットした ($N = L \times L$)。 4×4 のデータは厳密な対角化の値である。それぞれの Δ についてこの図の直線性は明らかで、無限系の基底状態エネルギーを推定できる。評価したエネルギーを第1表に示す。特に、反強磁性ハイゼンベルグモデル ($\Delta = -1$) の場合には、

Δ	E_0	$\langle M_x^2 \rangle_0$
0.5	-0.516 ± 0.001	0.100 ± 0.008
0	-0.5490 ± 0.0005	0.090 ± 0.006
-0.5	-0.599 ± 0.001	0.084 ± 0.010
-1	-0.670 ± 0.001	0.029 ± 0.008

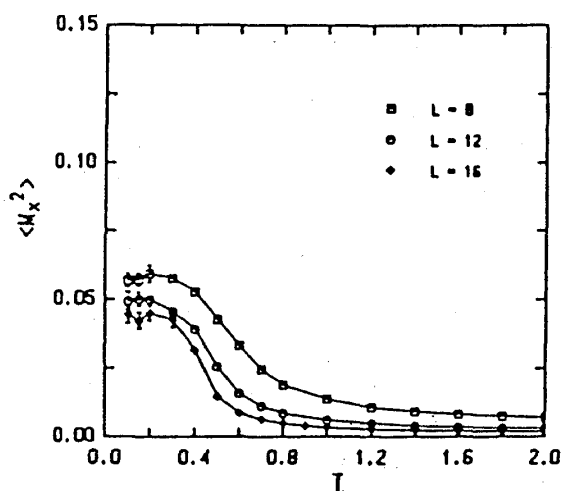
第1表 無限系の基底状態エネルギーおよび秩序パラメータの評価値。

最近のいろいろな数値的方法による推定値は、 0.669 ± 0.001 の範囲におさまって、一致が得られている。

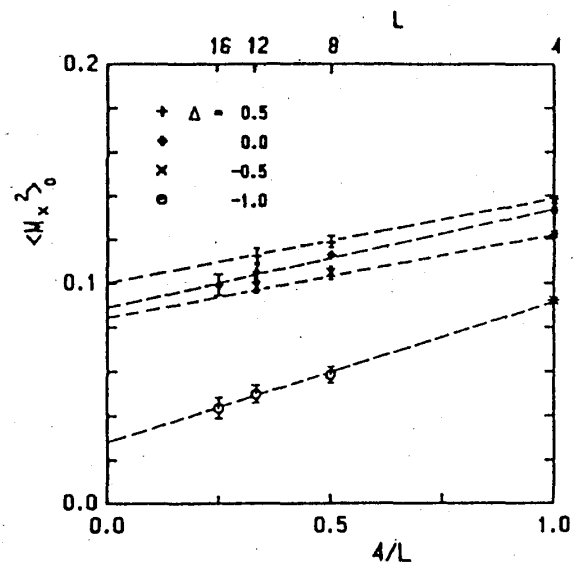
最近、Barnes et al⁵⁾ が、 Δ の関数として基底状態エネルギーを見たときの、 $\Delta = -1$ の前後での E_0 vs Δ の傾きの連続性と相転移について論じていることを付け加える。

3. 2 秩序パラメータおよび長距離秩序

秩序パラメータの温度依存性を反強磁性ハイゼンベルグモデル ($\Delta = -1$) の場合を例に示したのが第5図である。このサイズ依存性から、基底状態の秩序パラメータ $\langle M_x^2 \rangle_0$ のふるまいを議論しよう。Reger&Young⁶⁾ に従い、 $\langle M_x^2 \rangle_0$ を $1/L$ に対してプロットしたのが第6図である。この $1/L$ 依存性はスピン波理論に基づいている。このプロットから得た、無限系の $\langle M_x^2 \rangle_0$ の推定値も第1表に示してある。Mermin-Wegner 定理により2次元系の有限温度での長距離秩序は存在しないことが知られており、基底状態の秩序の存在の有無の議論は微妙である。最近、久保、西森ら⁷⁾ により、量子 XXZ モデルの基底状態の長距離秩序の存在の厳密な証明が論じられていて、 XY モデル ($\Delta = 0$) を含む Δ の広い範囲にわたって長距離秩序の存在が証明されている。今のところ、等方的な反強磁性ハイゼンベルグモデル ($\Delta = -1$) の周辺では証明がなされていないが、数値的に $\langle M_x^2 \rangle$ と同時に $\langle M_z^2 \rangle$ のふるまいを調べるのが先に述べた転移とも関連して興味があり、その計算は、現在進行中である。



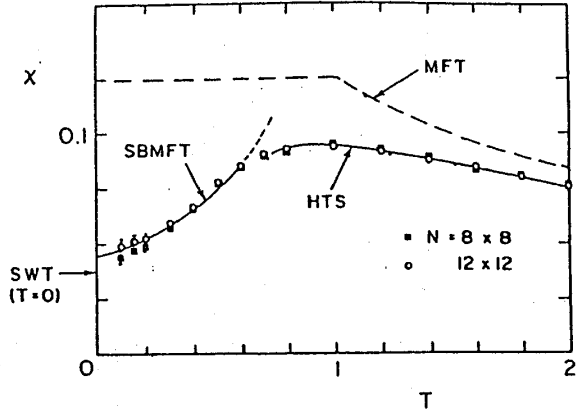
第5図 反強磁性ハイゼンベルグモデルの秩序パラメータの温度依存性。



第6図 秩序パラメータのサイズ依存性。

3. 3 反強磁性ハイゼンベルグモデルの一様帯磁率

また、実験との比較で興味深いので、反強磁性ハイゼンベルグモデルの一様帯磁率（通常の定義）の温度依存性を第7図に示す。 $T \sim 1.0$ で平らなピークを示し、 $T \rightarrow 0$ で ~ 0.05 に近づく。このふるまいはすでに宮下⁸⁾によって指摘されている。最近 Auerbach&Arovas⁹⁾ は、Schwinger boson 平均場理論で反強磁性ハイゼンベルグモデルの動力学を論じ、低温での帯磁率を計算した。第6図では、彼らの計算結果と高温展開の結果を我々のモンテカルロ法の計算結果と比較してある。この図からわかるように、シミュレーションの結果は、高温では高温展開、低温では Schwinger boson 理論とよく一致する。また $T = 0$ の値のスピン波理論との差を Auerbach&Arovas⁹⁾ が論じているが、我々の計算結果は測定の誤差範囲で Schwinger boson 理論の値に近いといえる。



第7図 反強磁性ハイゼンベルグモデルの一様帯磁率の温度依存性。平均場理論 (MFT)、高温展開 (HTS)、Schwinger boson 理論 (SBMFT)、スピン波理論 (SWT) と比較。

参考文献

- 1) P.W. Anderson, Science 235 (1987) 1196.
- 2) Y. Okabe and M. Kikuchi, J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 4351.
- 3) M. Kikuchi and Y. Okabe, J. Phys. Soc. Jpn., to appear.
- 4) T. Barnes and E.S. Swanson, Phys. Rev. B37 (1988) 9405.
- 5) T. Barnes, D. Kotchan and E.S. Swanson, preprint.
- 6) J.D. Reger and A.P. Young, Phys. Rev. B37 (1988) 5978.
- 7) H. Nishimori, K. Kubo, Y. Ozeki, Y. Tomita and T. Kishi, preprint.
K. Kubo and T. Kishi, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2585.
- 8) S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988), 1934.
- 9) A. Auerbach and D.P. Arovas, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 617.