

フラストレーションによる 整合-非整合遷移

野村 清英

九州大学物理学科

謝辞

- 村島 隆裕 (D3)、共同研究者
- Ian Affleck
- 西森 秀稔

1. 序

フラストレーションは近年、場の理論的アプローチや数値計算 (DMRG) などによる解明が進んできた。しかし、整合-非整合遷移は残された困難な問題の一つである。

(量子エンタングルメントとも関連?)

1. 非整合領域の発生
2. (VBS 点で) 相関距離最小 (直積状態)
3. 相関関数の挙動が 2 次元 Ornstein-Zernicke 型から 1 次元 Ornstein-Zernicke 型に移り変わる事
4. エッジ状態

について統一的説明を試みる。

1. 序

整合-非整合 (C-IC) 遷移を起こすモデル

- 次近接相互作用のある $S=1/2$ 量子スピン鎖

$$H = \sum_j (S_j S_{j+1} + \alpha S_j S_{j+2}),$$

($\alpha_D = 1/2$ で厳密解)

- $S=1$ bilinear-biquadratic 量子スピン鎖

$$H = \sum_j (S_j S_{j+1} + \alpha (S_j S_{j+1})^2),$$

($\alpha_D = 1/3$ で厳密解、VBS 状態),

- 次近接相互作用のある $S=1$ 量子スピン鎖

1. 序

相関関数の挙動

1. 整合領域

$$\langle S_0 S_n \rangle \approx (-1)^n n^{-1/2} \exp(-n/\xi(\alpha))$$

2. Disordered point at

$$\alpha = \alpha_D (\alpha_D = 1/2 \text{ for } S = 1/2, \alpha_D = 1/3 \text{ for } S = 1)$$

$$\langle S_0 S_n \rangle \approx (-1)^n \exp(-n/\xi(\alpha))$$

3. 非整合領域

$$\langle S_0 S_n \rangle \approx (-1)^n \cos(q(\alpha)n) n^{-1/2} \exp(-n/\xi(\alpha))$$

1. 序

相関関数はいずれも指数関数的に減衰するが、細かく見ると

1. 非整合領域での波数の変調 $q(\alpha)$
2. 整合領域、非整合領域どちらも 1+1 次元 (2 次元)
Ornstein-Zernicke 型 (変形ベッセル関数)

$$G(\vec{n}) = \int \frac{\exp(i\vec{q} \cdot \vec{n}) d^2q}{\vec{q}^2 + \xi^{-2}} = 2\pi K_0(|n|/\xi),$$

で、漸近的に $n^{-1/2} \exp(-n/\xi(\alpha))$ 。

3. 整合-非整合領域の間の disordered point では、純粹な指数関数型減衰。

であり、これらに関する統一的理解が必要。

1. 序

1995 年までは、**整合-非整合遷移点と VBS 点とは異なるという認識**

なお、この問題に対する場の理論的考察もある。

G. Fath and A. Suto: Phys. Rev. B 62 (2000) pp. 3778.

しかし、VBS 点では相関距離が極めて短いので、**連続近似が有効かどうか？**

また、後で見るように彼らの予想は数値計算とは合わない。

2. 整合-非整合遷移の特異性

- U. Schollwöck, Th. Jolicoeur, and T. Garel: Phys. Rev. B, Vol. 53 (1996) pp. 3304.
- A. Kolezhuk, R. Roth and U. Schollwöck: Phys. Rev. Lett., Vol. 77 (1996) pp. 5142
- A. Kolezhuk, R. Roth and U. Schollwöck: Phys. Rev. B, Vol. 55 (1997) pp. 8928

彼らは、DMRG による数値計算と、1次元古典系での整合-非整合遷移の類推から、以下の結論を得た。

2. 整合－非整合遷移の特異性

1. 整合－非整合領域の境界はちょうど VBS point. 彼らはこれを disordered point (α_D) と呼んだ。

2. 整合領域側からは

$$\left. \frac{d\xi(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha_D} = -\infty$$

3. 非整合領域側からは

$$\left. \frac{dq(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha_D} = \infty$$

4. 非整合領域で

$$q(\alpha) \propto (\alpha - \alpha_D)^\sigma, \quad \sigma \approx 1/2$$

2. 整合-非整合遷移の特異性

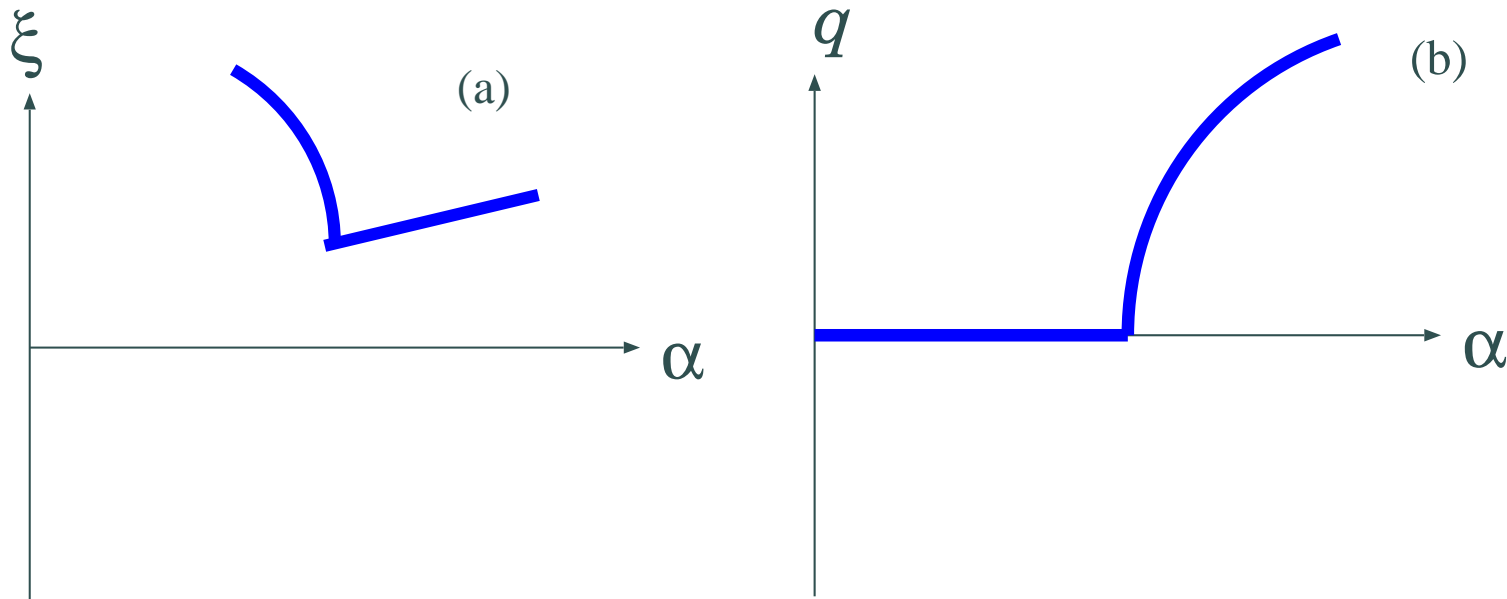


Figure 1: 相関距離 (a) と変調波数 (b) の挙動

2. 整合－非整合遷移の特異性

有限温度の1次元古典系イジングモデルで次近接相互作用のある問題の整合－非整合遷移からの類推

つまり、相関関数をフーリエ変換したもの（静的構造因子）を複素平面に解析接続して扱い、極の挙動から以上の結果を説明しようと試みた。

しかし、単純な極の挙動では、2次元 Ornstein-Zernicke 型の説明など辻褃が合わない。

実際、disordered 点 α_D 近傍での相関関数の正確な形がわからないため、数値計算の解析に不定性残る。

3. 構造因子の解析性

KN : J. Phys. Soc. Jpn, Vol.72, (2003) pp. 476

構造因子（相関関数のフーリエ変換）

$$S(q) \equiv \sum_n \exp(iqn)(-1)^n \langle S_0 S_n \rangle.$$

q を複素平面に拡張し、特異点を調べる。

3. 構造因子の解析性

1. 整合領域

$$S(q) \propto \frac{1}{\sqrt{q^2 + m^2}}.$$

2. VBS 的な点 (α_D)

$$S(q) \propto \frac{1}{q^2 + m^2}.$$

3. 非整合領域

$$S(q) \propto \frac{1}{\sqrt{(q - q(\alpha))^2 + m^2}} + \frac{1}{\sqrt{(q + q(\alpha))^2 + m^2}}.$$

これら 3 つの表現は、連続的にはつながらない。

3. 構造因子の解析性

分岐点と極による解釈:

次のような関数を考慮

$$f(z) \equiv (z^2 - d)^{-1/2},$$

(d 実数)

1. $d > 0$
 $z = \pm\sqrt{d}$ に2つの分岐線
2. $d = 0$
 $z = 0$ に極
3. $d < 0$
 $z = \pm i\sqrt{-d}$ に2つの分岐線

3. 構造因子の解析性

物理的な仮定

1. $S(q)$ は代数的特異点を除いて正則
2. $S(q)$ は実軸上で実数 ($S(q) = \bar{S}(\bar{q})$).
3. パリティより, $S(q) = S(-q)$.
4. $S(q)$ は α_D 近傍でパラメータ α の解析関数
5. α_D で $S(q)$ は2つの極であらわされる
6. 特異点、分岐線は実軸を横切らない

3. 構造因子の解析性

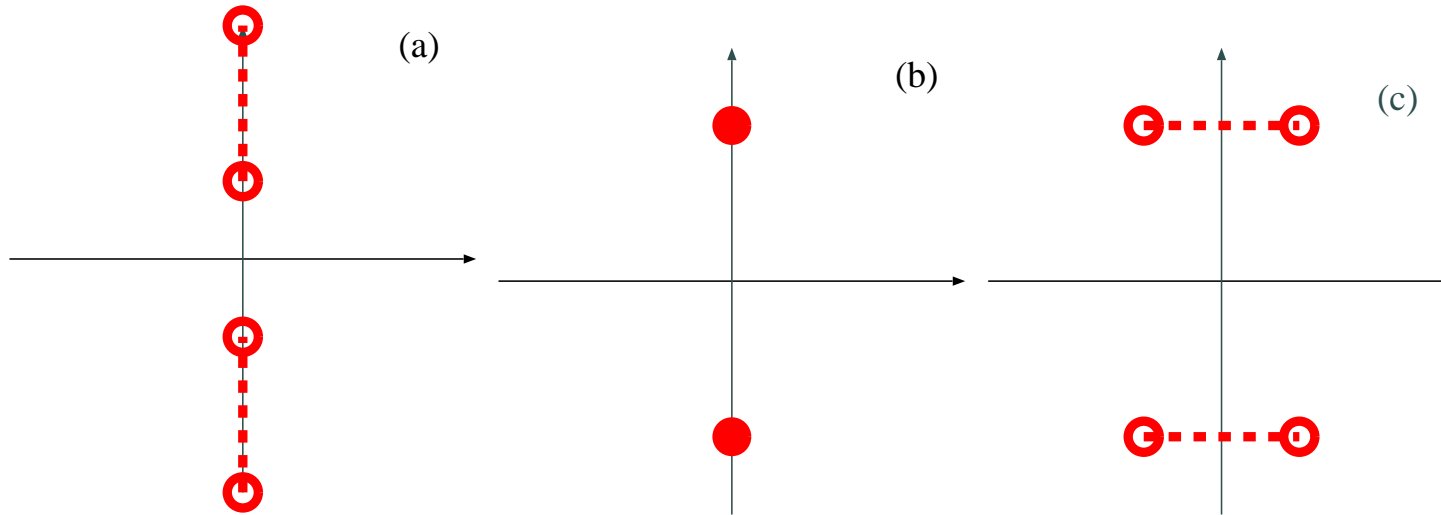
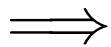


Figure 2: (a) 整合領域、 (b) α_D 、 (c) 非整合領域

整合領域：実軸に近い特異点が $S(q)$ の $|q| \ll 1$ の挙動を支配



相関関数の長距離の挙動

3. 構造因子の解析性

(特異性による) 構造因子は

$$(1) \quad S_{sing}(q) = Af(q + \tilde{m}i)f(q - \tilde{m}i)$$

$$(2) \quad S_{sing}(q) = A\frac{i}{2\tilde{m}}[f(q + \tilde{m}i) - f(q - \tilde{m}i)]$$

の2つの可能性がある。

3. 構造因子の解析性

次に実数のパラメータ A, \tilde{m}, d が $\alpha - \alpha_D$ の解析関数であること
と考慮して、

$$d = d_1(\alpha - \alpha_D) + d_2(\alpha - \alpha_D)^2 + O((\alpha - \alpha_D)^3),$$

$$\tilde{m} = \tilde{m}_0 + \tilde{m}_1(\alpha - \alpha_D) + O((\alpha - \alpha_D)^2).$$

従って、非整合波数 q_{IC} は

$$(3) \quad q_{IC} = \sqrt{\alpha - \alpha_D} \sqrt{d_1 + d_2(\alpha - \alpha_D)},$$

3. 構造因子の解析性

構造因子に対する予想で (1),(2) のどれが正しいか確認するために数値計算。

1. DMRG での相関関数。

- (a) 相関距離は短い、非整合波数も小さいため大きな系を扱う必要。
- (b) 端からの影響避ける必要。
- (c) 相関関数はエネルギー固有値に比べ数値精度低い。

2. (自由境界条件の) エッジ状態でのエネルギー固有値

- (a) 数値精度は高い。
- (b) 実軸からの距離の違う特異点、近距離のデータも重要。
- (c) 構造因子と関連つける必要。

4. グリーン関数、構造因子、エッジ状態

E. Sørensen and I. Affleck: Phys. Rev. B Vol. 49 (1994)
pp.15771

グリーン関数を

$$G(q, \kappa) = \frac{1}{\kappa^2 + g(q)}$$

と置くと、構造因子は

$$S(x, \tau) = \int \frac{d\kappa dq}{(2\pi)^2} \exp(iqx + i\kappa\tau) G(q, \kappa)$$

静的構造因子は

$$(4) \quad S(q) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \int \frac{d\kappa}{2\pi} G(q, \kappa) = \frac{1}{\sqrt{g(q)}}$$

4. グリーン関数、構造因子、エッジ状態

一方、エッジ状態に関しては

$$S_{eff} = (-1)^L \lambda^2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_L \int d\tau_1 d\tau_L \frac{d\kappa dq}{(2\pi)^2} G(q, \kappa) \exp(iq(L-1) + i\kappa(\tau_L - \tau_1))$$

(λ 実数、後で問題に)

したがって、エッジ状態の singlet-triplet ギャップは

$$(5) \quad \Delta E_{ST}(L-1) = (-1)^L \lambda^2 \int \frac{dq}{2\pi} \frac{\exp(iq(L-1))}{g(q)}$$

4. グリーン関数、構造因子、エッジ状態

1. 具体的に (1) 式に対しては

$$\begin{aligned}\Delta E_{ST} &= (-1)^L \lambda^2 \frac{A^2 \exp(-\tilde{m}(L-1))}{4\tilde{m}\sqrt{d}\sqrt{\tilde{m}^2+d}} \sin(\sqrt{d}(L-1) + \phi(\tilde{m}, d)) \\ &= (-1)^L A' \exp(-\tilde{m}(L-1)) \sin(\sqrt{d}(L-1) + \phi(\tilde{m}, d))\end{aligned}$$

ここで $\phi(\tilde{m}, d) = \arctan(\sqrt{d}/\tilde{m})$

2. (2) 式に対しては

$$\begin{aligned}\Delta E_{ST} &= (-1)^L \lambda^2 \frac{A^2 \exp(-\tilde{m}(L-1))}{4\tilde{m}^2\sqrt{d}} \sin(\sqrt{d}(L-1)) \\ &= (-1)^L A' \exp(-\tilde{m}(L-1)) \sin(\sqrt{d}(L-1))\end{aligned}$$

3. 整合領域では $d < 0$ だが、単純に $\sin(ix) = i \sinh(x)$ などと解析接続すれば済む。

4. グリーン関数、構造因子、エッジ状態

なお、(2) 式に対しては上反面にのみ特異性を持つ成分と下半面にのみ特異性を持つ成分を分離して扱った。

5. 格子構造

これまでは、格子の構造を考えていなかった。また、(無限遠を除く)複素平面上すべてで正則関数となるものも考慮していなかった。格子の構造を取り入れるために、構造因子に $S(q) = S(q + 2\pi)$ という要請をおくと、

$$(6) \quad S(q) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} S_{sing}(q + 2\pi j) + S_{reg}(q),$$

となる。ここで S_{sing} は特異点からの寄与、 $S_{reg}(q)$ は周期性を持つ正則関数

$$S_{reg}(q) \equiv \sum_{j=-\infty}^{\infty} a_j \cos(jq).$$

6. 数値計算

KN and T. Murashima: J. Phys. Soc. Jpn, Vol. 74 (2005)

Suppl. pp. 42

+ 現在執筆中

- S=1 bilinear-biquadratic (BLBQ) スピン鎖

$$H = \sum_{j=1}^N h_j, \quad h_j = S_j S_{j+1} + \alpha (S_j S_{j+1})^2$$

以下自由境界条件とする。

6. 数値計算

KN and T. Murashima: J. Phys. Soc. Jpn, Vol. 74 (2005)

Suppl. pp. 42

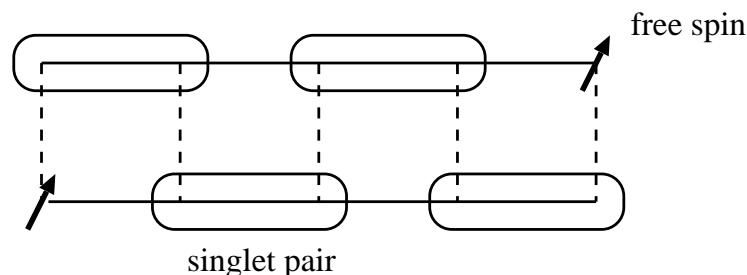
+ 現在執筆中

- S=1 bilinear-biquadratic (BLBQ) スピン鎖

$$H = \sum_{j=1}^N h_j, \quad h_j = S_j S_{j+1} + \alpha (S_j S_{j+1})^2$$

以下自由境界条件とする。

- $\alpha_D = 1/3$ ($S = 1/2$) \otimes ($S = 1/2$) = ($S = 0$) \oplus ($S = 1$)



6. 数値計算

$$\Delta E_{\text{ST}} = E_{\text{triplet}} - E_{\text{singlet}} \quad (\textit{Openboundarycondition})$$

(1),(2) 式から ΔE_{ST} は

1. α 固定したばあい、 N について (減衰) 振動
2. N 固定したばあい、 α について振動

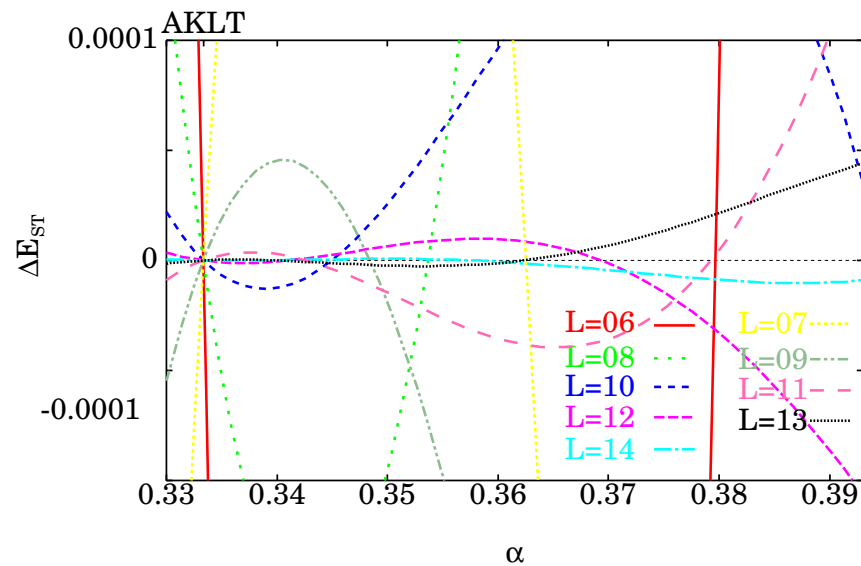
6. 数値計算

$$\Delta E_{ST} = E_{\text{triplet}} - E_{\text{singlet}} \quad (\textit{Openboundarycondition})$$

(1),(2) 式から ΔE_{ST} は

1. α 固定したばあい、 N について (減衰) 振動
2. N 固定したばあい、 α について振動

S=1 BLBQ OBC

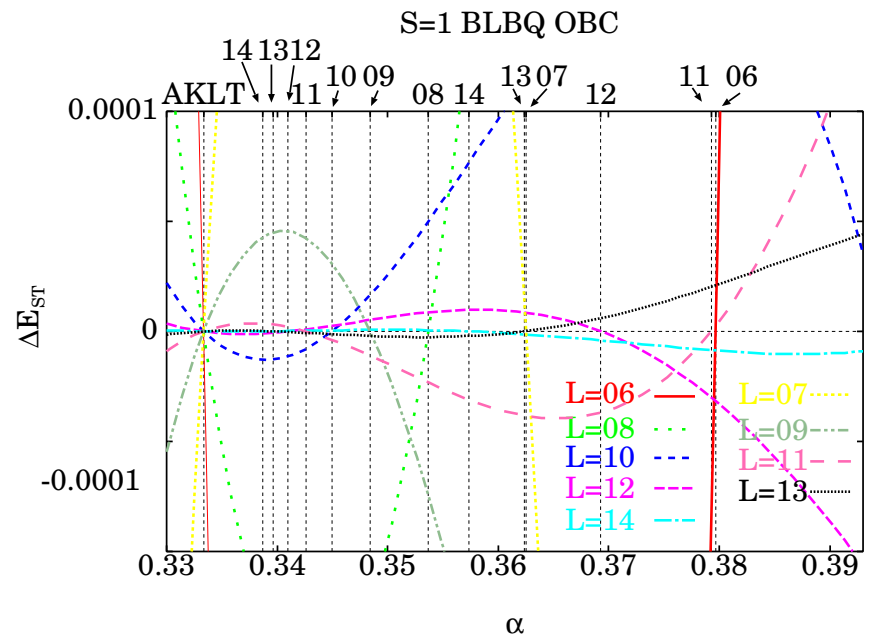
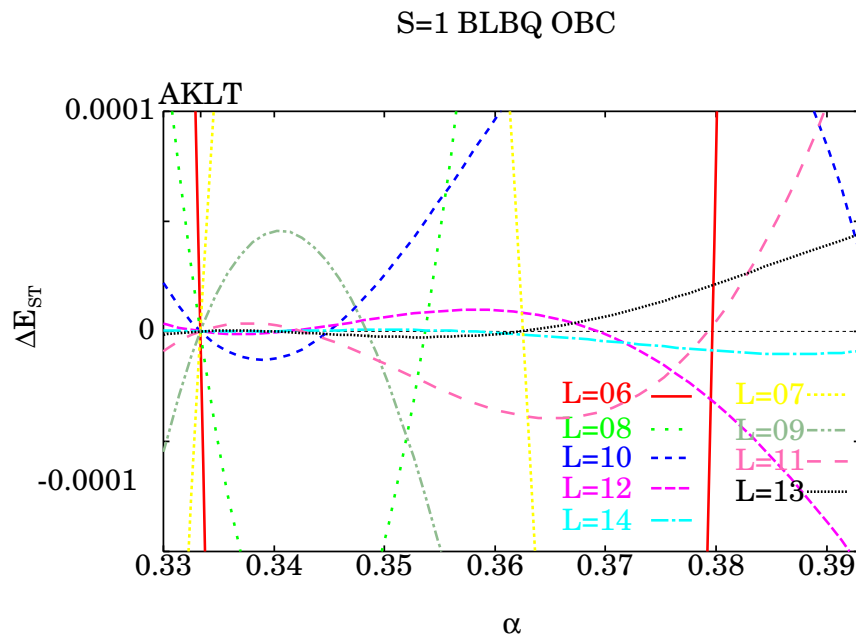


6. 数値計算

$$\Delta E_{ST} = E_{\text{triplet}} - E_{\text{singlet}} \quad (\text{Openboundarycondition})$$

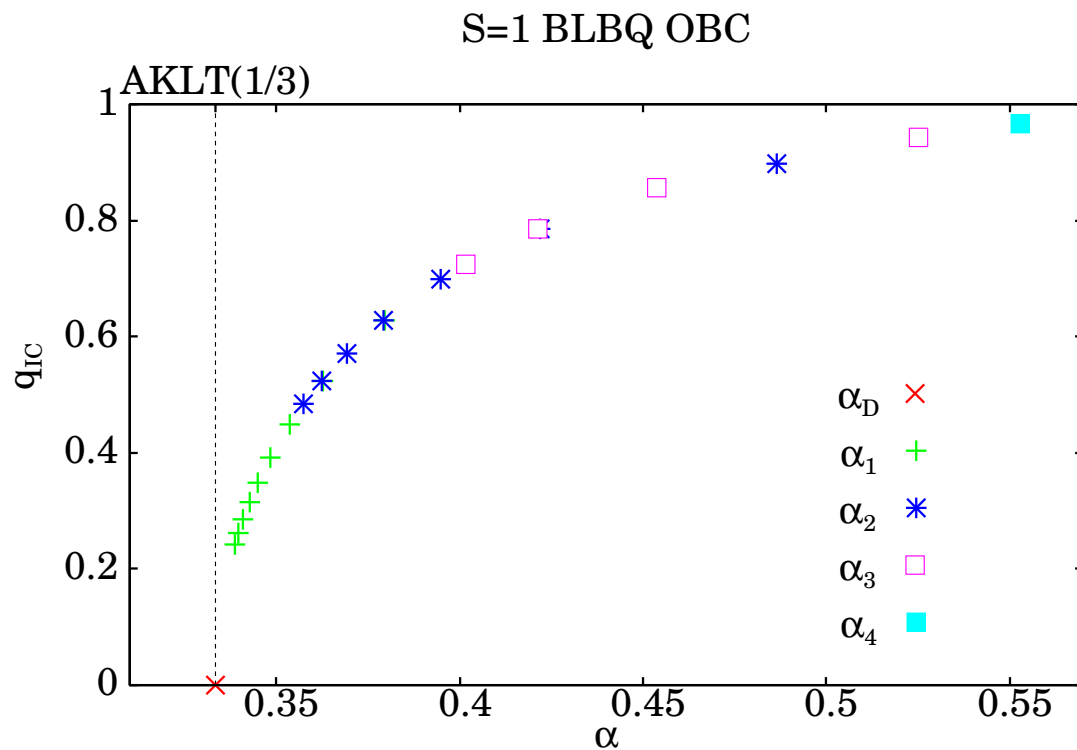
(1),(2) 式から ΔE_{ST} は

1. α 固定したばあい、 N について (減衰) 振動
2. N 固定したばあい、 α について振動



6. 数値計算

(2) の関数形を仮定して ΔE_{ST} のゼロ点から $q_{IC}(\alpha_n(N)) = \frac{\pi n}{N}$ でデータを整理すると、



$q_{IC} \propto \sqrt{\alpha - \alpha_D}$ のユニバーサルな曲線に乗る。

6. 数値計算

変調波数 q_{IC} のパラメータ依存性

● $q_{IC}^2 = d_1(\alpha - \alpha_D) + d_2(\alpha - \alpha_D)^2$ の関数形では、

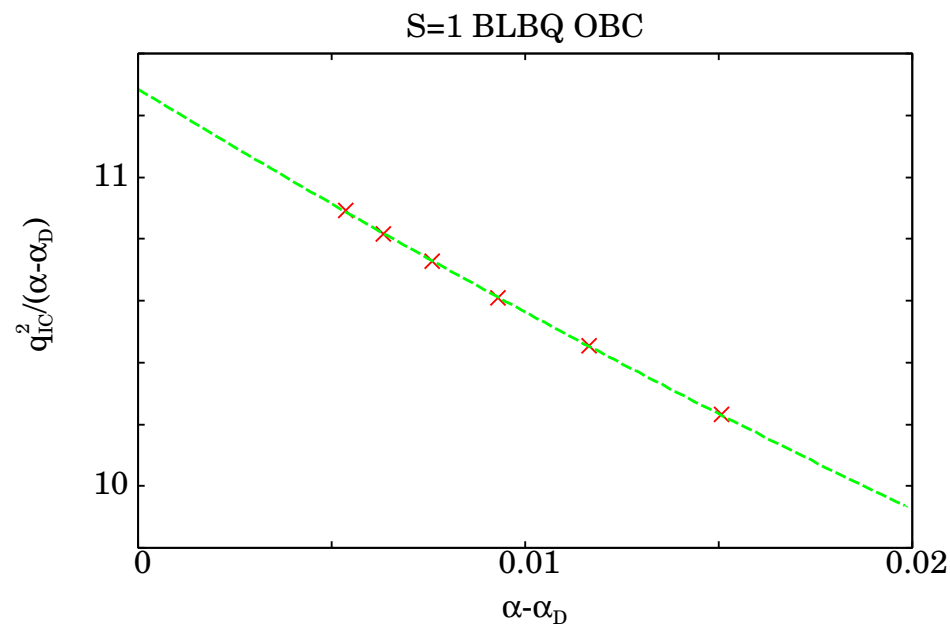
$$d_1 = 11.230 \pm 0.010, d_2 = -65.76 \pm 0.8$$

6. 数値計算

変調波数 q_{IC} のパラメータ依存性

● $q_{IC}^2 = d_1(\alpha - \alpha_D) + d_2(\alpha - \alpha_D)^2$ の関数形では、

$$d_1 = 11.230 \pm 0.010, d_2 = -65.76 \pm 0.8$$

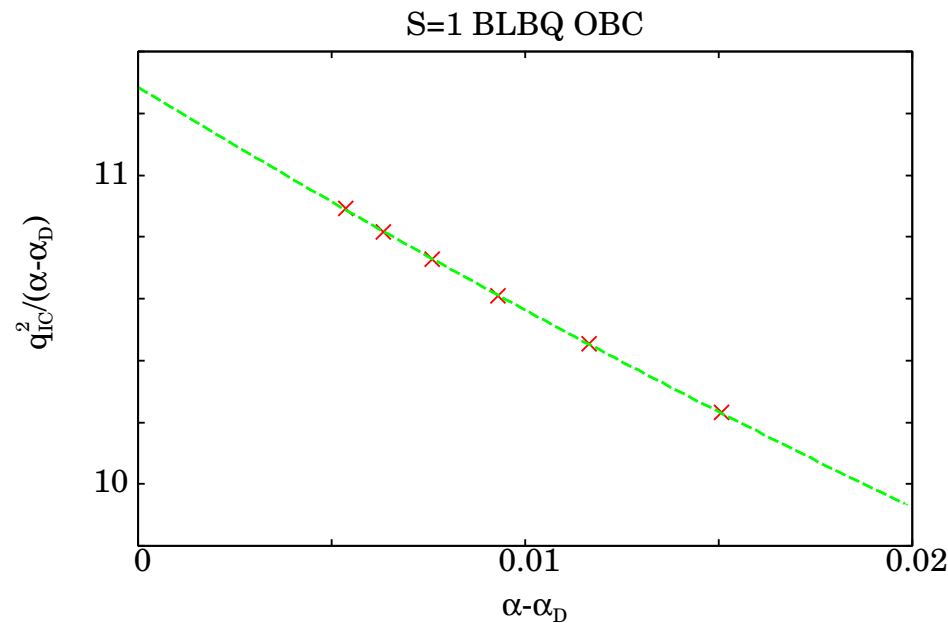


6. 数値計算

変調波数 q_{IC} のパラメータ依存性

- $q_{IC}^2 = d_1(\alpha - \alpha_D) + d_2(\alpha - \alpha_D)^2$ の関数形では、

$$d_1 = 11.230 \pm 0.010, d_2 = -65.76 \pm 0.8$$



- これは、(2) を支持 (cf. (1) では $1/N$ の補正)。

6. 数値計算

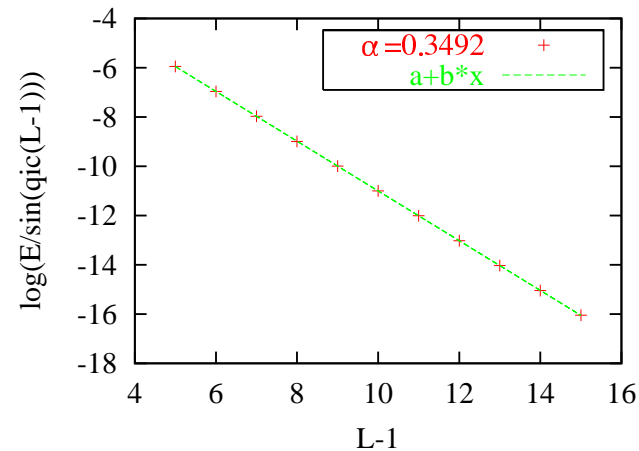
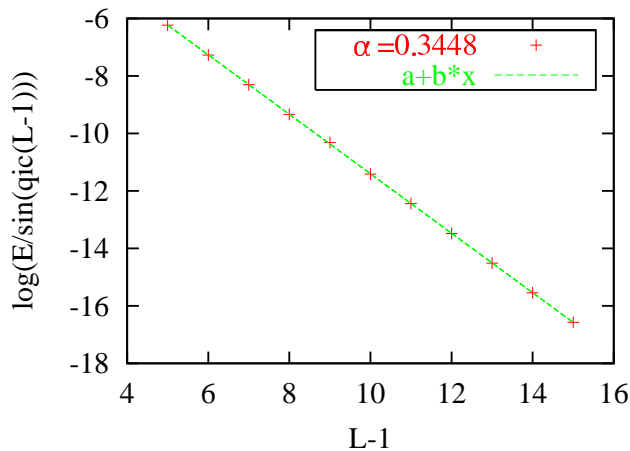
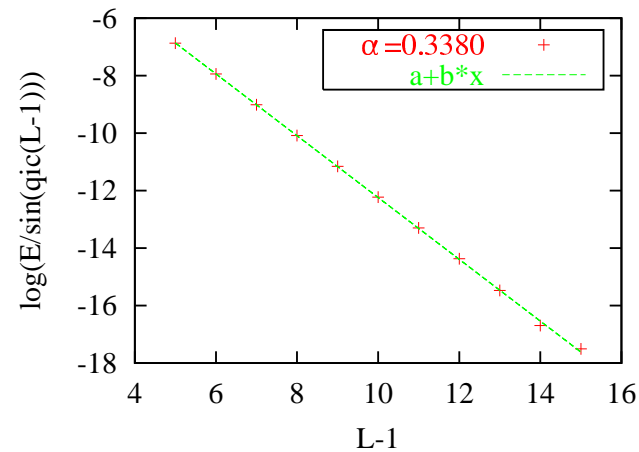
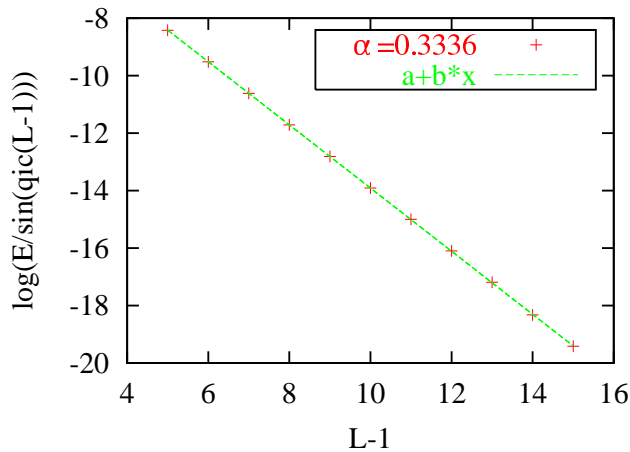
相関長 ξ , 係数 A

$$\log \left| \frac{\Delta E_{ST}(L)}{\sin(q_{IC}(L-1))} \right| = \log A - \frac{L-1}{\xi} \quad ??$$

6. 数値計算

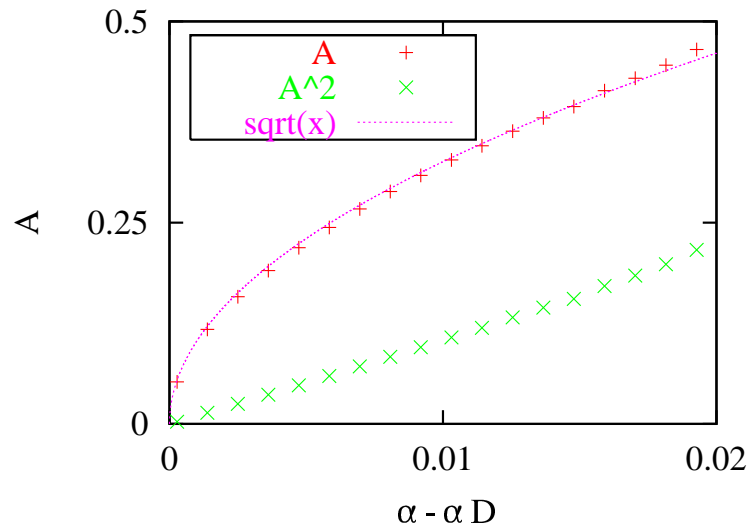
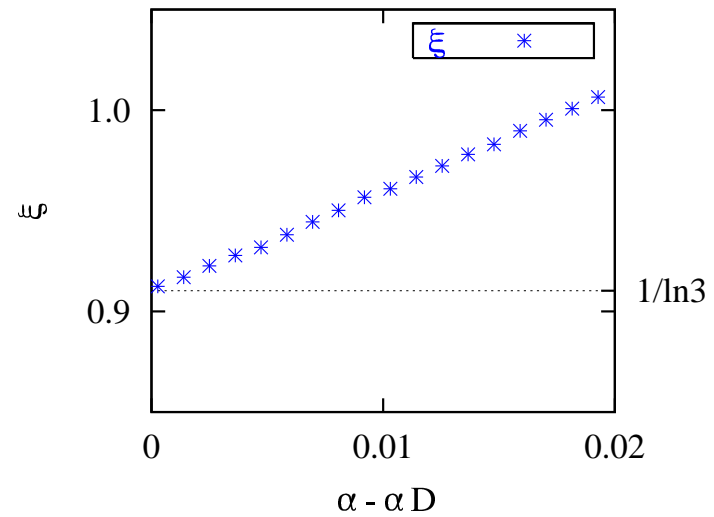
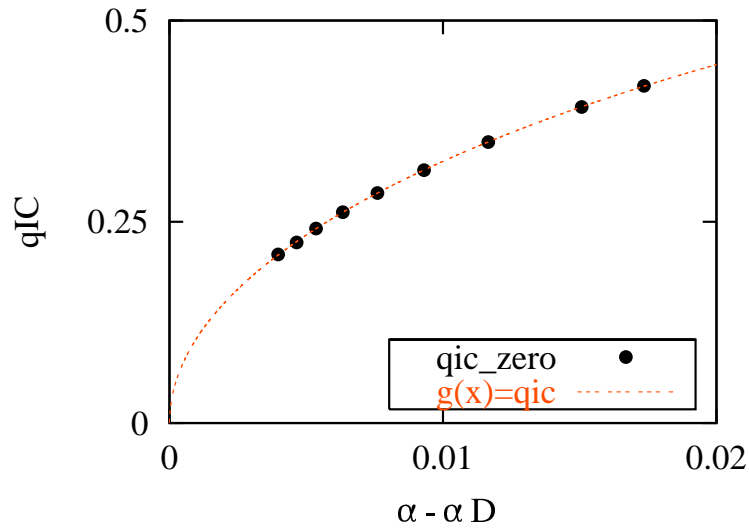
相関長 ξ , 係数 A

$$\log \left| \frac{\Delta E_{ST}(L)}{\sin(q_{IC}(L-1))} \right| = \log A - \frac{L-1}{\xi} \quad ??$$



6. 数値計算

非整合領域 ($\alpha > \alpha_D$)



6. 数値計算

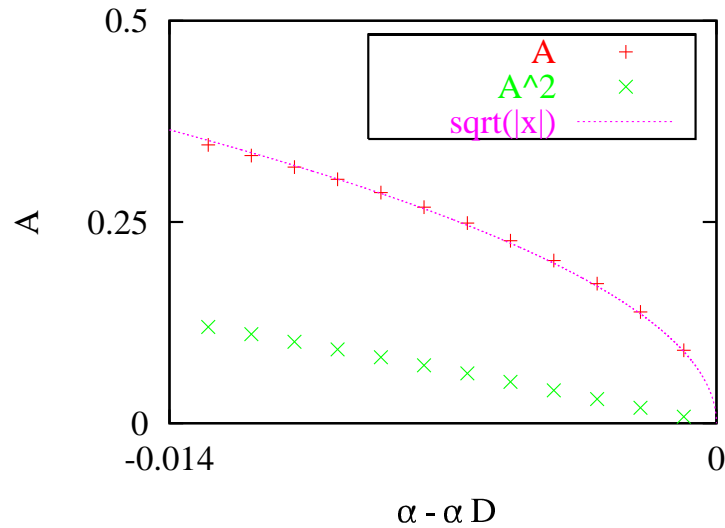
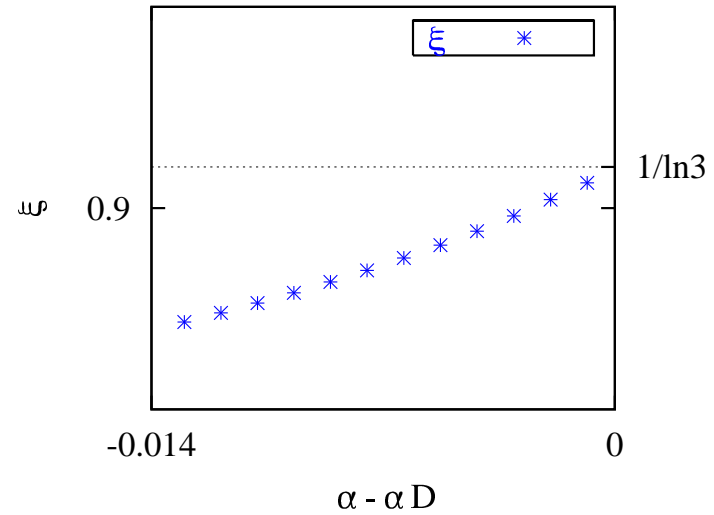
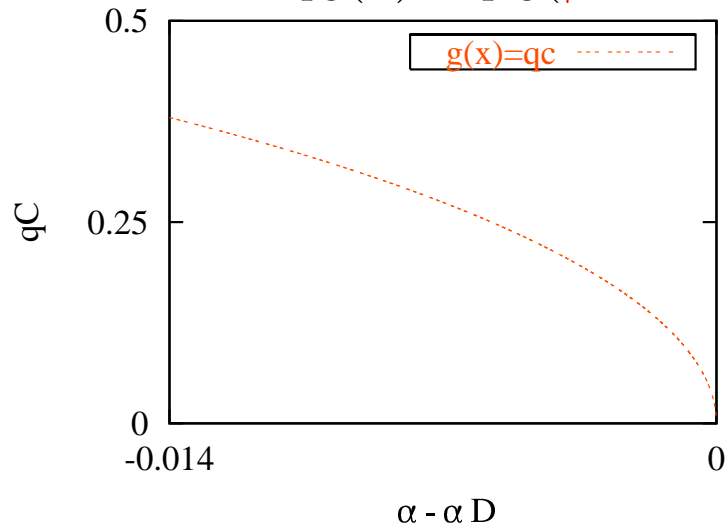
整合領域 ($\alpha < \alpha_D$)

$$q_C(\alpha) = q_{IC}(|\alpha - \alpha_D|), \quad \sin(iq_C) \implies \sinh(q_C)$$

6. 数値計算

整合領域 ($\alpha < \alpha_D$)

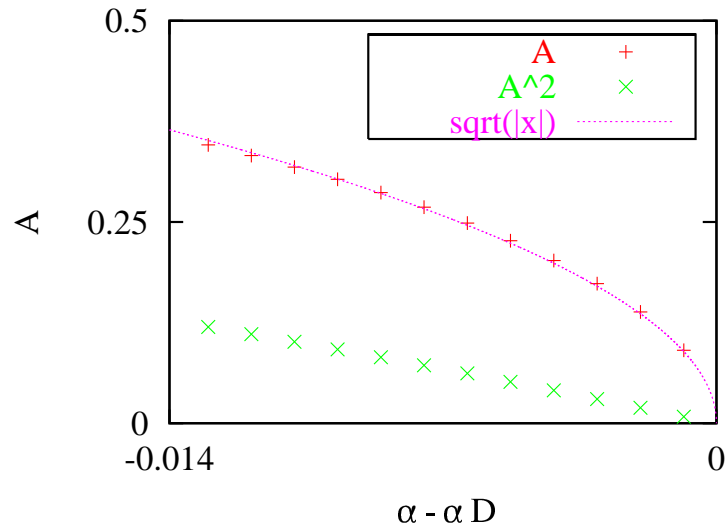
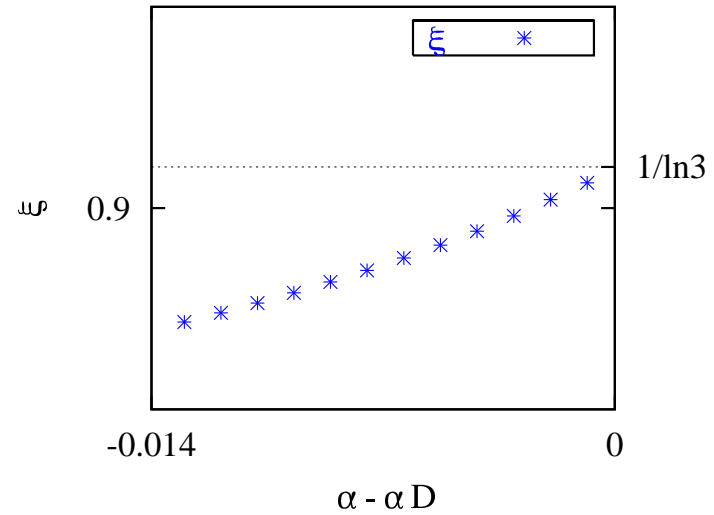
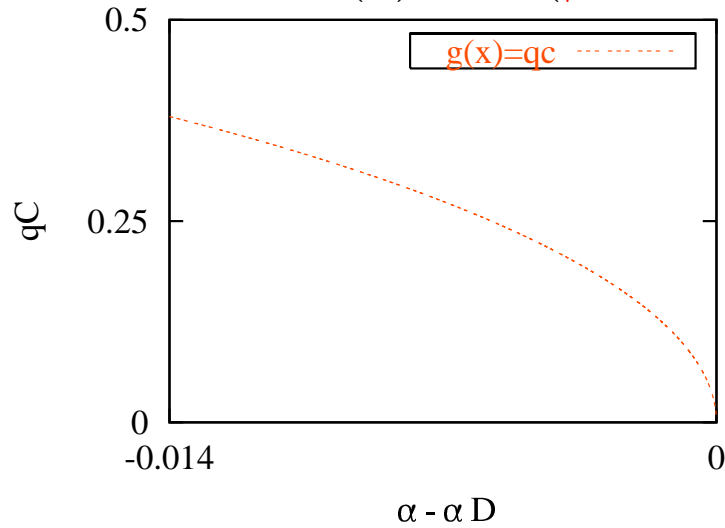
$$q_C(\alpha) = q_{IC}(|\alpha - \alpha_D|), \quad \sin(iq_C) \implies \sinh(q_C)$$



6. 数値計算

整合領域 ($\alpha < \alpha_D$)

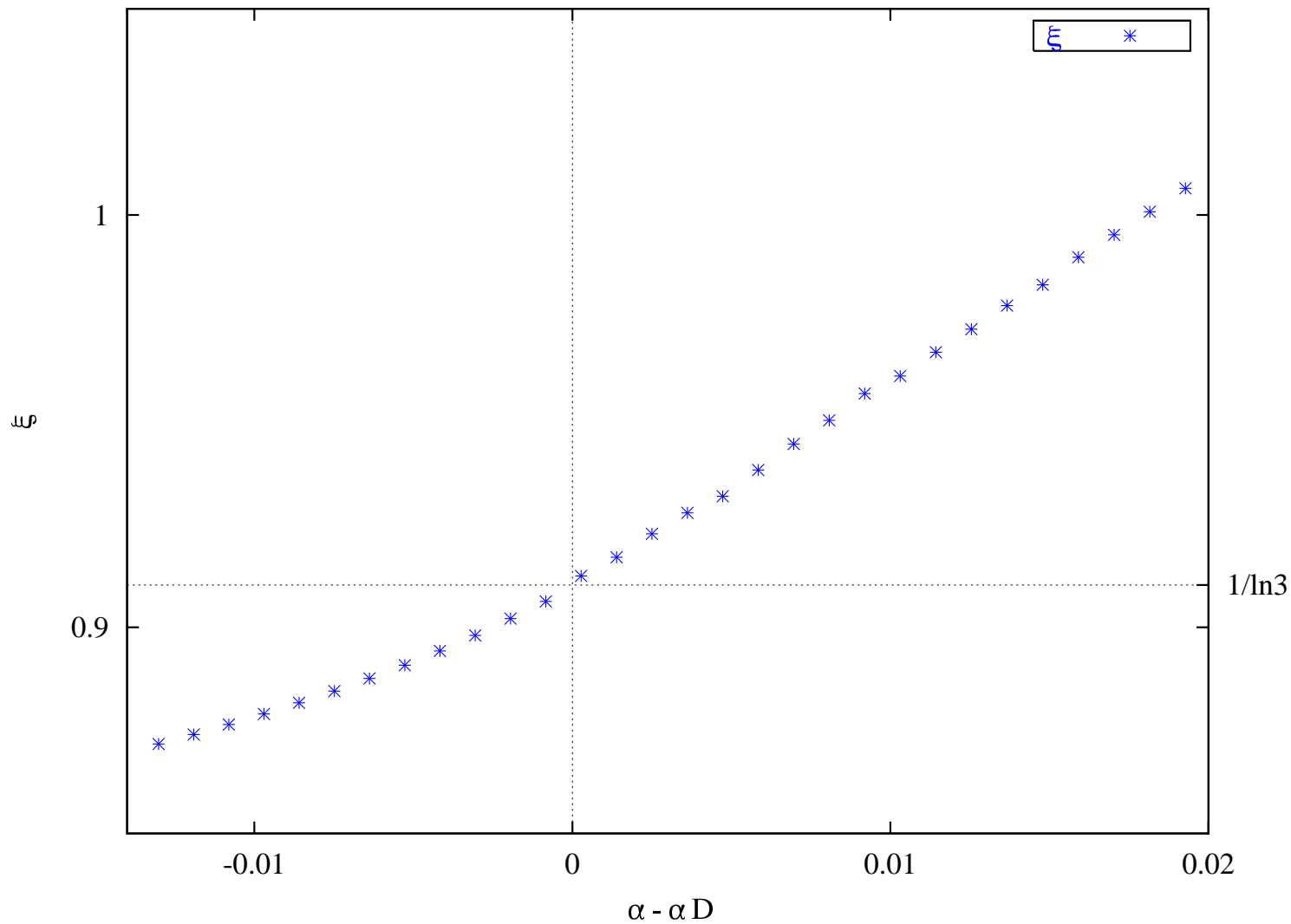
$$q_C(\alpha) = q_{IC}(|\alpha - \alpha_D|), \quad \sin(iq_C) \implies \sinh(q_C)$$



\implies 非整合領域の結果と滑らかにつながる！

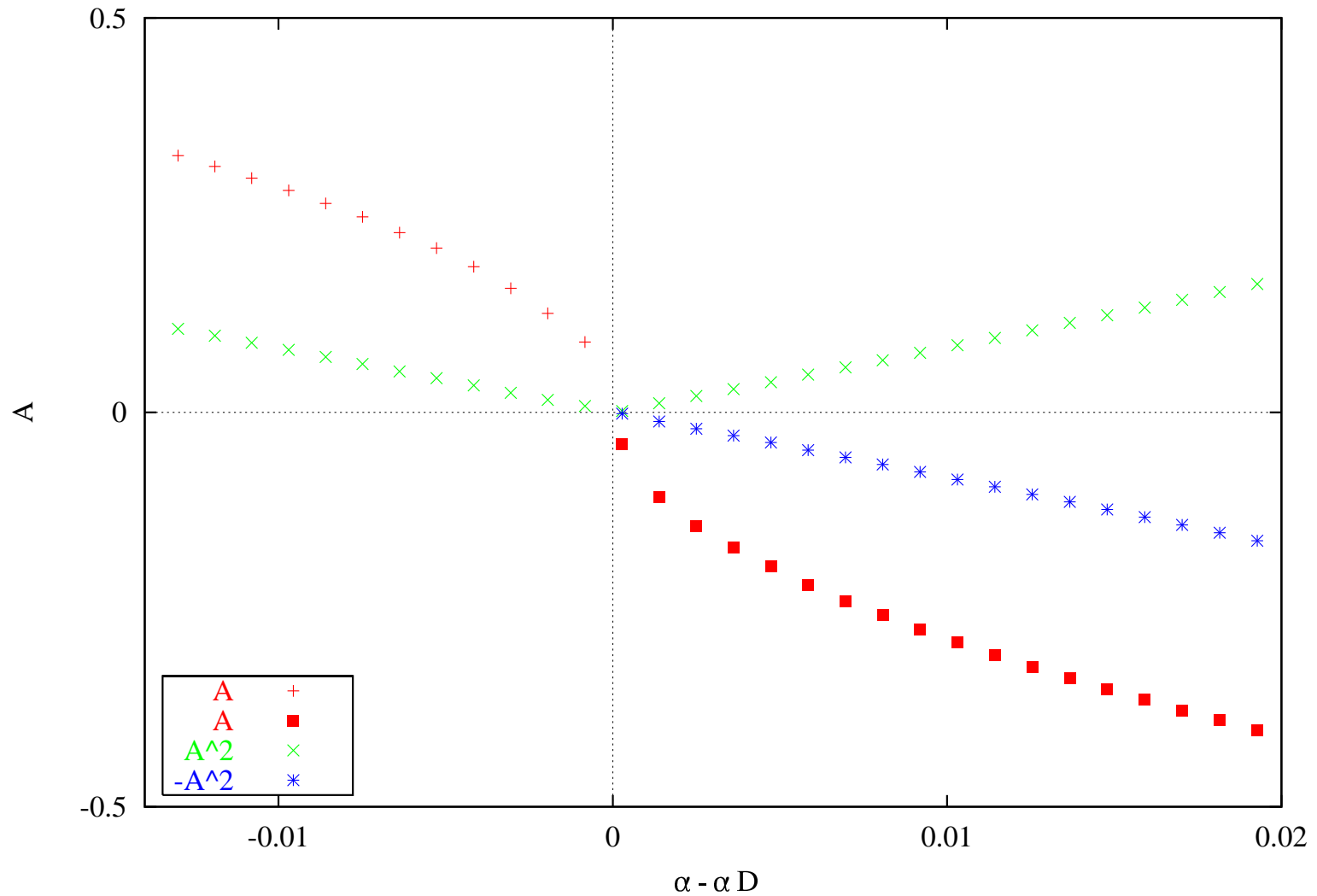
6. 数値計算

相関長 ξ



6. 数値計算

係数 A



7. 結論

- エッジ状態の振舞い (VBS 点の近くで)

$$\Delta E_{\text{ST}}(L) = A \sin(q_{\text{IC}}(L - 1))e^{-(L-1)/\xi}, \quad (\alpha > \alpha_{\text{D}})$$

$$\Delta E_{\text{ST}}(L) = A \sinh(q_{\text{C}}(L - 1))e^{-(L-1)/\xi}, \quad (\alpha < \alpha_{\text{D}})$$

から、**整合-非整合遷移は対になって存在する極の運動として捉えることができる。**

7. 結論

● エッジ状態の振舞い (VBS 点の近くで)

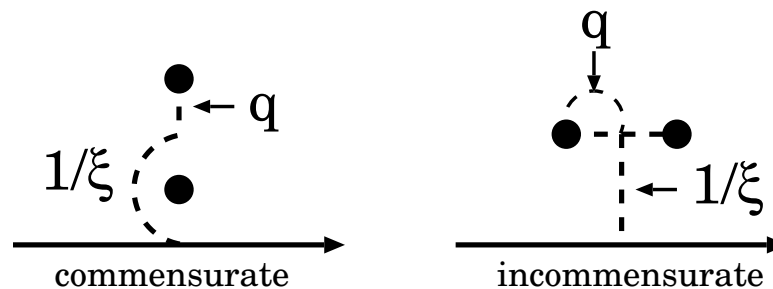
$$\Delta E_{\text{ST}}(L) = A \sin(q_{\text{IC}}(L - 1))e^{-(L-1)/\xi}, \quad (\alpha > \alpha_{\text{D}})$$

$$\Delta E_{\text{ST}}(L) = A \sinh(q_{\text{C}}(L - 1))e^{-(L-1)/\xi}, \quad (\alpha < \alpha_{\text{D}})$$

から、**整合-非整合遷移は対になって存在する極の運動として捉えることができる。**

非整合波数 $q \implies$ 極間の距離 ($/2$ 、極と重心との距離)

相関長 $\xi \implies$ 一組の極の重心の実軸からの距離 (の逆数)



ここでいう相関長は通常の意味と違う。
普通は、実軸に近い方の極と実軸との距離の逆数で定義される。

7. 結論

- $S(q)$ の積の形 (1) について同様の解析を行なったが、うまくいかない。

⇒ $S(q)$ の形は $f(z)$ の積の形ではなく、差の形 (2) である。

$$S_{\text{sing}}(q) = A \frac{i}{2\tilde{m}} [f(q + \tilde{m}i) - f(q - \tilde{m}i)]$$

⇒ Fátih-Sütöの結果 ×

G. Fátih and A. Sütö: P. R. B 62 (2000) 3778

- $\lambda^2 \propto \alpha - \alpha_D$: Sørensen-Affleck の議論に修正必要。
- $S=1/2$ NNN のモデル: 零点の分布については同様な結果。

8. 今後の課題

- (DMRGなどで) 相関関数を直接扱ってみる... 関数形が複雑になるので厄介。
- 他のモデル ($S=1$ NNN など) における整合-非整合遷移について考察する。
- $S=1/2$ NNN のモデルで、Green 関数の議論拡張する必要
 - $S=1$ ではマグノン
 - $S=1/2$ ではスピノン
- 磁化プラトーのある系などへの応用。
- 高次元への拡張
- 4 体相互作用のある量子梯子系

A. Sørensen-Affleck の議論

E. S. Sørensen and I. Affleck, P. R. B 49(1994),15771

● 出発点 \Rightarrow 非線形 σ モデル

$$(6) \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right)^2 - \frac{m^2}{2} \vec{\phi}^2$$

$$(6) \quad \vec{\phi}(2i + 1/2) = [\mathbf{S}_{2i+1} - \mathbf{S}_{2i}]/(2s)$$

$$(6) \quad \mathbf{l}(2i + 1/2) = [\mathbf{S}_{2i+1} + \mathbf{S}_{2i}]/(2a)$$

$$(6) \quad \mathbf{l} = \frac{1}{v} \vec{\phi} \times \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t}$$

A-1. Sørensen-Affleck の議論 ~ 相関関数

$$\mathbf{S}_i = s(-1)^{i-1} \vec{\phi} + a\mathbf{1}, \quad \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = s^2(-1)^{i+j} \langle \vec{\phi}_i \cdot \vec{\phi}_j \rangle + a^2 \langle \mathbf{1}_i \cdot \mathbf{1}_j \rangle$$

$$[a_q, a_{q'}^\dagger] = 4\pi\omega_q \delta(q - q'), \quad \omega_q = \sqrt{q^2 + m^2},$$

$$(5) \quad \vec{\phi} = \int \frac{dq}{4\pi\omega_q} (a_q e^{-i\omega t + iqx} + a_q^\dagger e^{+i\omega t - iqx})$$

$$\langle 0 | \vec{\phi}_i \cdot \vec{\phi}_j | 0 \rangle = \int \frac{dq}{4\pi} e^{iqx} \frac{1}{\sqrt{q^2 + m^2}} = \frac{1}{2\pi} K_0(x/\xi) \quad (\xi = 1/m) \frac{e^{-|x|/\xi}}{2\sqrt{2\pi|x|/\xi}}$$

グリーン関数が分岐点を上半面と下半面に一つずつもつ

$$(5) \quad \langle S_0^z S_x^z \rangle \sim \exp(-x/\xi) / \sqrt{x}$$

A-2. Sørensen-Affleck の議論 ~ エッジ状態

Open boundary condition(OBC) における端の $S = 1/2$ スピンの相互作用

$$(5) \quad \mathcal{H}_I = -\lambda[s\vec{\phi}(1) \cdot \mathbf{S}'_1 + a\mathbf{l}(1) \cdot \mathbf{S}'_1 - s\vec{\phi}(L) \cdot \mathbf{S}'_L + a\mathbf{l}(L) \cdot \mathbf{S}'_L]$$

$$\int \mathcal{D}\vec{\phi} e^{-S(\vec{\phi}) + \int d\tau \lambda [\mathbf{S}'_1 \cdot \vec{\phi}(1, \tau) - \mathbf{S}'_L \cdot \vec{\phi}(L, \tau)]} = e^{-S_{\text{eff}}}$$

$$S_{\text{eff}} = -\frac{\lambda^2}{2} \int \frac{d\tau_1 d\tau_2 dq d\kappa}{(2\pi)^2} \frac{[\mathbf{S}'_1(\tau_1) - \mathbf{S}'_L(\tau_1)] \cdot [\mathbf{S}'_1(\tau_2) - \mathbf{S}'_L(\tau_2)]}{\kappa^2 + q^2 + m^2} e^{i[q(L-1) - \kappa(\tau_1 - \tau_2)]}$$

($\tau_2 \approx \tau_1$ のまわりで、 $\mathbf{S}'_{1,L}(\tau_2)$ をテイラー展開する。)

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \lambda^2 \mathbf{S}'_1 \cdot \mathbf{S}'_L \int \frac{dq}{2\pi} \frac{1}{q^2 + m^2} e^{iq(L-1)} = \frac{\lambda^2 \mathbf{S}'_1 \cdot \mathbf{S}'_L \xi}{2} e^{-(L-1)/\xi}, \quad (\xi = 1/m)$$

グリーン関数が極を上半面と下半面に一つずつもつ

$$(5) \quad E_{\text{triplet}} - E_{\text{singlet}} = A\xi \exp(-(L-1)/\xi)$$

A-3. 今回の問題への変形

相関関数を直接取り扱うより、singlet-triplet 間のエッジ状態を取り扱う方が問題の見通しがよくなる。

	グリーン関数の特異性	関数形
相関関数	分岐点	変形ベッセル関数
エッジ状態	極	指数関数

整合-非整合問題は、グリーン関数の特異性が影響している。

$S(q)$ の解析において非整合領域では上半面と下半面に分岐点が二つずつある。



非整合領域では pole が二つずつ上半面と下半面にあるはず。

$$E_{\text{triplet}} - E_{\text{singlet}} = A \sin(q(L-1)) e^{-(L-1)/\xi} \quad ??$$