歪んだダイヤモンド型XXZスピン鎖の基底状態

東京工業大学 大学院理工学研究科　岡本 清美[1]，市川 豊

図のような$S=1/2$の歪んだダイヤモンド型スピン鎖で，相互作用にXXZ異方性がある場合の基底状態を解析的および数値的に調べた．ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= J_1 \sum_j \{h_{3j-1,3j}(\Delta) + h_{3j,3j+1}(\Delta)\} + J_2 \sum_j h_{3j+1,3j+2}(\Delta) \\ &\quad + J_3 \sum_j \{h_{3j-2,3j}(\Delta) + h_{3j,3j+2}(\Delta)\} \qquad (1) \\ h_{l,m}(\Delta) &= S_l^x S_m^x + S_l^y S_m^y + \Delta S_l^z S_m^z \qquad (2) \end{aligned}$$

で表され，ΔがXXZ異方性のパラメーターである．3種類の相互作用はいずれも反強磁性的$(J_1, J_2, J_3 > 0)$とし，また，$J_1 \geq J_3$として一般性を失わない(J_1とJ_3は入れ換え可能である)．

この歪んだダイヤモンド型スピン鎖の等方的な場合$(\Delta = 1)$はもともと三量体スピン鎖$Cu_3Cl_6(H_2O)_2 \cdot 2H_8C_4SO_2$のモデルとして提案されたものである[1]. Okamoto達[2]は$\Delta = 1$の場合について零磁場基底状態相図を調べ，飽和磁化M_sの1/3のフェリ相，ダイマー相，スピン液体(SF)相，の3種の相が存在することを示し，相図を決定した(図2の$\Delta = 1$参照)．その後，磁化曲線や，$(1/3)M_s$プラトー相図，$(2/3)M_s$プラトー相図，帯磁率の温度変化，などについても調べられている[3, 4, 5, 12].

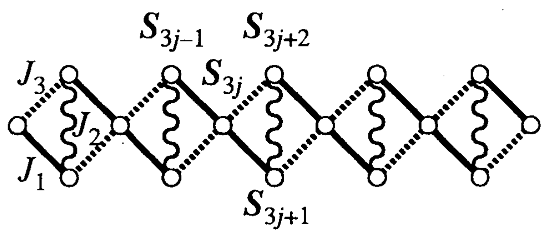

図 1: 歪んだダイヤモンド型スピン鎖

この系は，三量体性[6, 7, 8, 9]とフラストレーション[10, 11]の両者を併せ持っていて，特徴的な相図や2箇所のプラトーは，両者のからみで生じたものである．本研究では，相互作用の異方性を導入することにより，三量体性，フラストレーション，異方性の三者の微妙なバランスによって，さらに興味深い零磁場基底状態相図が得られることを示した．図2は我々が最終的に数値計算(厳密対角化データをレベルスペクトロスコピーで解析したもの)で決定した相図で，相互作用がXY的($\Delta = 0.5$である場合，等方的な場合$(\Delta = 1)$，Ising的$(\Delta = 2.5)$，の三者を示した．図で，$\tilde{J}_2 \equiv J_2/J_1$，$\tilde{J}_3 \equiv J_3/J_1$である．$\Delta = 1$の等方的な場合はすでにOkamoto達[2]によって得られている．

最も注目すべきところは，$\Delta \neq 1$の場合に存在する中央の細い領域で，相互作用がXY的であるのにNéel相が現れ，また，相互作用がIsing的であるのにスピン液体(SF)相が現れている．す

[1]E-mail:kokamoto@stat.phys.titech.ac.jp

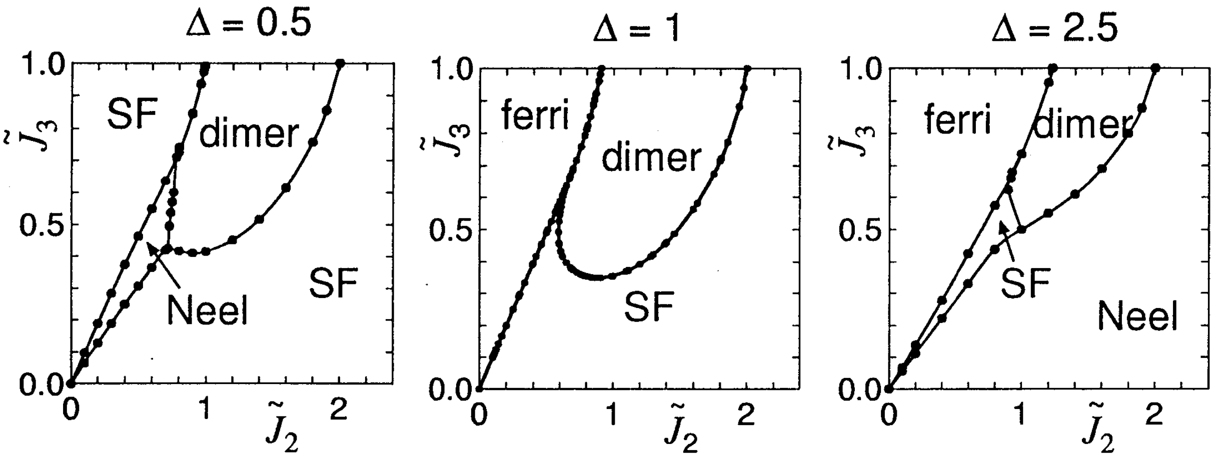

図 2: 歪んだダイヤモンド型 XXZ スピン鎖の無磁場基底状態相図

なわち，相互作用の異方性と，それから自然に予想される基底状態との関係が逆転している．このような「逆転相」の存在は，我々の知る限り，本研究で初めて指摘されたものである．逆転相の存在に関しては $\Delta = 1$ は特異点になっていて，$\Delta \to 1 \pm 0$ の極限でも逆転相は有限の範囲で残る．後に示すように，$\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$ では $\Delta \to 1 \pm 0$ の極限で $0.625\tilde{J}_2 < \tilde{J}_3 < \tilde{J}_2$ が逆転相になっている．

以下，我々がどのようにして相図を得たかについて述べる．まず，三量体性が強い極限 $\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$ での縮退摂動論を展開しよう．$\tilde{J}_2 = \tilde{J}_3 = 0$ では 3 スピン問題で (図 1 の実線で結ばれた 3 スピン)．$2^3 = 8$ 通りの状態があるが，それらのうちでエネルギーの低い重要な状態は $S^z_{\rm tot} = \pm 1/2$ の最低状態

$$\psi_1 = (1/A)(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - a|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle), \qquad \psi_2 = (1/A)(|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - a|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) \tag{3}$$

である．ここで，$|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ 等は順に $3j-1, 3j, 3j+1$ 番目のスピン状態であり，

$$a = (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 8})/4, \qquad A = \sqrt{a^2 + 2} \tag{4}$$

である．状態空間をこれら 2 状態に限定して大きさ 1/2 の擬スピン $\boldsymbol{T}$ の $|\Uparrow\rangle$ と $|\Downarrow\rangle$ で表現し，J_2, J_3 の最低次で実効ハミルトニアンを求めると

$$H_{\rm eff} = \sum_j \left\{ \frac{J^{xy}_{\rm eff}}{2}(T^x_j T^x_{j+1} + T^y_j T^y_{j+1}) + J^z_{\rm eff} T^z_j T^z_{j+1} \right\} \tag{5}$$

が得られる．ただし

$$J^{xy}_{\rm eff} = \frac{a}{(a^2+2)^2}(4aJ_2 - 8J_3), \qquad J^z_{\rm eff} = \frac{a(a^2-2)}{(a^2+2)^2}\{a^2 J_2 - 2(a^2-2)J_3\} \tag{6}$$

である．

$\Delta = 1$ の等方的な場合は $a = 2$ で，$J^{xy}_{\rm eff} = J^z_{\rm eff} = (4/9)(J_2 - J_3)$ になる．したがって，基底状態は，$J_2 > J_3$ では $\boldsymbol{T}$ の擬スピン描像で SF 状態 (もとの $\boldsymbol{S}$ でも SF 状態)，$J_2 \leq J_3$ では $\boldsymbol{T}$ の擬ス

ピン描像でフェロ状態 (もとの $\boldsymbol{S}$ で $M_s/3$ フェリ状態) である．これは図 2 の $\Delta = 1$ の場合のフェリ–SF 境界が原点付近で傾き 1 であることを説明している．

$\Delta \neq 1$ の場合に移ろう．基底状態は次のようになっている．

	$J^z_{\rm eff}/\lvert J^{xy}_{\rm eff}\rvert \le -1$	$-1 < J^z_{\rm eff}/\lvert J^{xy}_{\rm eff}\rvert \le 1$	$1 < J^z_{\rm eff}/\lvert J^{xy}_{\rm eff}\rvert$
$\boldsymbol{T}$ 描像	フェロ	SF	Néel
$\boldsymbol{S}$ 描像	$(M_{\rm S}/3)$ フェリ	SF	Néel

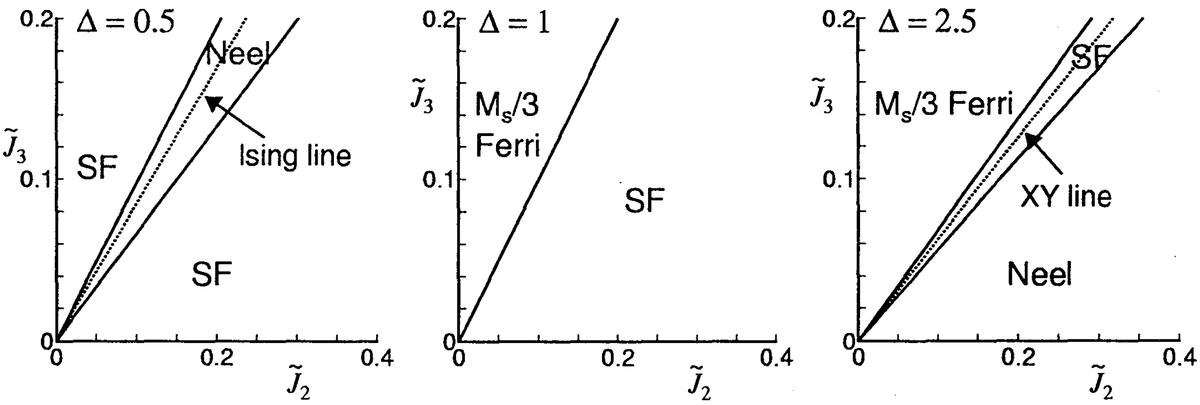

図 3: 縮退摂動論による相図

$\Delta = 0.5, 1, 2.5$ の場合の相図を図 3 に示した．Ising line 上では $J^{xy}_{\rm eff} = 0$，XY line 上では $J^z_{\rm eff} = 0$，である．$\Delta \neq 1$ の場合の右側の相境界線は $\Delta \to 1$ で傾きが 0.625 になるが，$\Delta = 1$ ではこの相境界線が消滅し，SF 相と Néel 相の区別がなくなり共に SF 相になる．この意味で，$\Delta = 1$ は特異点になっている．式の上では，因子 $a - 2$ (この因子は $\Delta = 1$ の場合にゼロ) の作用による．左側の相境界線については特異な事情はない．

上の縮退摂動論は $\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$ に限られているし，ダイマー状態を記述することはできない．したがって，相境界線を具体的に決めるには数値計算に依らざるを得ない．我々は，有限系の厳密対角化データをレベルスペクトロスコピーで解析することにより，相境界線を決定した [2]．スピン数 N，$S^z_{\rm tot}$ の固有値が M の部分空間における最低エネルギーを $E_0(N, M)$ と書くとき，今の場合に重要な励起は，

$$\Delta E_{\rm SF}(N) \equiv E_0(N, \pm 1) - E_0(N, 0) \tag{7}$$

$$\Delta E_{\rm Neel}(N) \equiv E_{\rm Neel}(N, 0) - E_0(N, 0) \tag{8}$$

$$\Delta E_{\rm dimer}(N) \equiv E_{\rm dimer}(N, 0) - E_0(N, 0) \tag{9}$$

の 3 つである．ここで，$\Delta E_{\rm Neel}(N)$ と $\Delta E_{\rm dimer}(N)$ は共に $M = 0$ 部分空間での低い励起状態で，空間反転に対する対称性で区別できる．また，$\Delta E_{\rm Neel}(N)$ は $\Delta = 1$ で $E_0(N, \pm 1)$ と縮退する (つまり，$S_{\rm tot} = 1$ の $S^z_{\rm tot} = 0, \pm 1$ の 3 状態になっている)．上の 3 つの励起を比べて，最低励起に対応する状態が基底状態になっている．このようにして求めた相境界が図 2 に示したものである．$\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$ での相境界は直線で，その傾きは縮退摂動論の結果と一致している．

謝辞

利根川孝，鏑木誠，両氏には有用な議論をしていただいた．また，数値計算の一部は西森秀稔氏の TITPACK Ver.2 を使用している．

参考文献

[1] M. Ishii, H. Tanaka, M. Mori, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Tatani, Y. Narumi and K. Kindo: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 340.

[2] K. Okamoto, T. Tonegawa, Y. Takahashi and M. Kaburagi: J. Phys.:Condensed Matter, **11** (1999) 10485.

[3] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi and M. Kaburagi: to be published in Supple. J. Phys. Soc. Jpn. (2000);

[4] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi and M. Kaburagi: RIKEN Review No.27 (April, 2000) 60.

[5] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi and M. Kaburagi: to be published in J. Phys. Chem. Solids

[6] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 2359

[7] K. Okamoto: Solid State Commun. **98** (1996) 245.

[8] K. Okamoto and A. Kitazawa: J. Phys. A: Math. Gen. **32** (1999) 4601.

[9] A. Kitazawa and K. Okamoto: J. Phys.: Cond. Matter **11** (1999) 9765-9774.

[10] K. Okamoto and K. Nomura: Phys. Lett. A **169** (1992) 433.

[11] K. Nomura and K. Okamoto: J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 1123.

[12] A. Honecker and A. Läuchli: cond-mat/0005398