

競合する相互作用をもつ 1 次元 $S=1/2$ スピン鎖 におけるカイラル短距離秩序

岡山大学 理学部 原田 勲¹

1 次元 $S=1/2$ 量子スピン鎖における chiral 秩序の振る舞いや、他の秩序、例えば dimer 秩序、との関連を調べるため、次の 2 つの模型を取り上げる：模型 1（最近接 Heisenberg 交換相互作用）+（最近接 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用）；模型 2（最近接 Heisenberg 交換相互作用）+（次近接 Heisenberg 交換相互作用）。模型 1 では Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用により chirality の縮退は破られているのに比べ、模型 2 ではその縮退が残っている。これらの比較を基に、1 次元 $S = 1/2$ 量子スピン鎖における chiral 秩序の特徴を明らかにする。

1 はじめに

1 次元 $S = 1/2$ 量子スピン系は量子揺らぎのもっとも顕著な系であり、これまで spin-fluid, spin-Peierls 転移, spin gap 等様々な話題を提供してきた。特に、交換相互作用が競合する系は量子揺らぎと相互作用の競合により、新しい基底状態、dimer 状態、が出現し、基底状態エネルギーから 3 重項最低励起エネルギーまで有限の energy gap を持つ事などが知られている。[1] また、この dimer 状態では、2 体スピン相関関数が指数関数的に減衰することを反映し、静的スピン構造因子は Lorentz 関数型となる。しかも、その Lorentz 関数は競合の程度に依存した不整合な波数でピークを形成することが明らかにされている。[2]

一方、同じ競合する交換相互作用を有する 1 次元古典スピン鎖は基底状態において Helical 秩序を形成することが古くから知られている。この場合、スピンは完全に Helical に秩序化するため、静的スピン構造因子はスピンの回転角に対応した不整合な波数でデルタ関数型となる。

それでは量子スピン系に Helical 秩序状態は存在するのだろうか。1 次元スピン系では 2 体スピン相関関数は減衰するので、Helical 秩序状態でのスピンの回転に対応した chiral 秩序変数を次のように定義する：

$$\mathbf{K}_n = [\mathbf{S}_n \times \mathbf{S}_{n+1}]. \quad (1)$$

¹E-mail:harada@cc.okayama-u.ac.jp

ここで S_n は n 番目の site の spin-1/2 演算子を表す. 最近, 鏑木達は数値計算により, 容易面型異方性を有する 1 次元 $S = 1$ スピン系での chiral 秩序相の存在を [3], また, Nersesyan 達は解析的議論より $S = 1/2$ スピン系でも chiral 秩序相が存在するであろうと予測している. [4] 私達は視点を変え, 量子スピン系での chiral 秩序の形成がどの様に成され, それらはどのような性質を示すのかを, 以下の 2 つの模型を用いてしらべた.

第 1 の模型は以下の Hamiltonian で記述される: [5]

$$\mathcal{H} = 2J \sum_n [S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + \delta S_n^z S_{n+1}^z] + d(S_n^x S_{n+1}^y - S_n^y S_{n+1}^x), \quad (2)$$

ここで $J(> 0)$ は最近接交換相互作用定数, $\delta(\geq 0)$ は異方性定数, d は Dzyaloshinskii-Moriya (D-M) 相互作用定数ベクトルの大きさでその向きは $+z$ 軸方向と仮定した. このスピン系は第 2 項のため chirality の縮退が破られており, chiral 秩序の存在は自明である. 私達はこの系における様々な物理量を, 次の模型 2 の結果と比較・対照することにより, chiral 秩序状態の性質を明らかにする.

第 2 の模型は以下の Hamiltonian で記述される:

$$\mathcal{H} = 2J \sum_n [\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + j \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+2}]. \quad (3)$$

ここで $j(\geq 0)$ は次近接交換相互作用定数と最近接交換相互作用定数の比を表す. このスピン系は spin gap を生じる系として知られ, これまで数多くの研究がある [1]. この系の基底状態は, $j > j_c = 0.24$ の時, singlet dimer order を示し, triplet state との間に energy gap が存在する. 一方, $j \leq j_c$ の時は gapless で $j = 0$ の時と同様に spin fluid となることが知られている. このような等方的な系に chiral 秩序は存在しないが, dimer order 相にも chiral 短距離秩序は既に形成されている. これら chiral 短距離秩序と静的スピン構造因子が示す不整合波数の関係を調べ, その相の特徴を明らかにする.

2 手法

Hamiltonian (2) および (3) で記述される量子スピン鎖の基底状態における様々な物理量を求めるため, 有限スピン系の厳密対角化法, また動的スピン相関関数を求めるために同じく有限スピン系厳密対角化を含む Gagliano and Balseiro の方法, [6] 有限温度での熱力学量を求めるために転送行列法を適用する. [7]

3 結果

前章で述べた方法を用いて求めた結果を, 模型 1 と模型 2 に分けて述べる. 模型 1 ではスピンの回轉變換が有効で, この変換により様々な物理量は D-M 相互作

用を含まない Hamiltonian で記述される。このことはスピン系の対称性とも関連し、模型 2 ではその様な変換は無い。

・模型 1

この系は chirality の縮退が破れており、次のスピン回転変換

$$\sigma_n = U_n \mathbf{S}_n, \quad (4)$$

where

$$U_n = \begin{pmatrix} \cos \phi_n & \sin \phi_n & 0 \\ -\sin \phi_n & \cos \phi_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

およびその回転角度 Q を $\tan Q \equiv \tan(\phi_{n+1} - \phi_n) = d$ と置くことにより、Hamiltonian (2) は

$$\overline{\mathcal{H}} = 2J \sum_n [\sqrt{1+d^2}(\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y) + \delta \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z], \quad (6)$$

と書き換えられる。この変換は正に chirality の破れにより可能になったものである。もし私達が、1 格子間隔を進む毎に z 軸の周りに角度 Q だけ回転する座標系に乗れば、全ての物理は D-M 相互作用が無い系と同じであることを示す。ただし座標の回転に対応して、波数空間では波数が Q だけずれ、例えば、スピンの構造因子は Q に対応した不整合波数にピークを持つ。ピークの位置を中心に構造因子は対称で、ピークの位置は温度によっても変化しない。

・模型 2

競合する相互作用を有する量子スピン模型 2 は chiral 短距離秩序の存在さえ自明でない。私達はその起源を探るため、3 角格子 (3 スピン系) を考え、chirality を対角化する固有関数と singlet dimer を表現する固有関数が簡単な線形結合で書かれることを示し、それら 2 つの秩序状態の関係を示した。このような考察から、zig-zag 鎖における次近接相互作用による dimer 秩序の実現や、chiral 短距離秩序の発達との関係が理解される。特に、この系では chirality の縮退が残っており、このことが模型 1 と異なって様々な物理量に反映し、この系の特徴的な振る舞いを生み出すことが示された。

4 まとめ

以上、D-M 相互作用を有する 1 次元 $S = 1/2$ 量子スピン鎖および競合する交換相互作用を有する 1 次元 $S = 1/2$ 量子スピン鎖における chiral 秩序を調べた。前者では Hamiltonian に D-M 相互作用が存在し、従って chiral 対称性が破られており、その秩序の存在は自明である。このことと関連しスピンの回転変換が存在し、この系は D-M 相互作用の無い系と等価になる。例えば、その静的スピン構造

因子のピークは不整合波数に位置するが、強磁性体や反強磁性体の場合と同じくピーク位置は温度により変化しない。

一方、後者では chiral 短距離秩序の起源が spin singlet dimer と深く関係していることが 3 スピンの解析から明らかにされた。従って 3 角格子の積み重ねと見なされる模型 2 での dimer 相においても、chiral 短距離秩序は存在し、次近接相互作用が大きくなるに従い発達する様子が数値計算で確かめられた。相互作用が異方的な場合、基底状態での chiral 長距離秩序の可能性が残されており、このことは最近の理論結果と整合する。

量子揺らぎの激しい 1 次元 $S = 1/2$ 量子スピン系においても、chiral 秩序に関連した現象が実現され得る可能性が高い。もしその様な現象が実験で見つかれば、chiral soliton 等、これまでにない新しい概念がうち立てられ、これらの系の新しい側面を切り拓くものと期待される。

謝辞

森重喜博士、西山由弘博士との議論、計算に関する助言は大変有益であった。ここに深く感謝する。

参考文献

- [1] 例えば, I. Harada and T. Tonegawa, *Recent Advances in Magnetism of Transition Metal Compounds* (Edited by A. Kotani and N. Suzuki), p.348 World Scientific, Singapore (1993).
- [2] I. Harada, Y. Nishiyama, Y. Aoyama and S. Mori, *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* **69** (2000), 339.
- [3] M. Kaburagi, H. Kawarura and T. Hikihara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** (1999), 3185.
- [4] A. A. Nersesyan, A. O. Gogolin, and F. H. L. Essler, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), 910.
- [5] I. Harada, *Rep. Res. Lab. for Surface Sci., Okayama Univ.* **7** (1991) 23.
- [6] S. Mori, I. Harada and T. Tonegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67** (1998), 1409.
- [7] I. Harada, T. Kimura and T. Tonegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57** (1988), 2779.