

次近接相互作用と1イオン型異方性をもつ $S = 1$ ハイゼンベルグ鎖におけるカイラル秩序相

大阪大学 理学部 引原 俊哉、川村 光
神戸大学 国際文化学部 鍋木 誠

フラストレーションと1イオン型異方性をもつ $S = 1$ ハイゼンベルグ鎖の基底状態を、特にカイラル秩序相の出現に注目して調べた。このカイラル秩序相では、古典的なヘリカル秩序無しに、最近接スピン間のカイラリティ $\kappa_l = S_l^x S_{l+1}^y - S_l^y S_{l+1}^x$ のみが長距離秩序している。我々は系の基底状態相図を数値的に決定した。その結果、カイラル秩序相が相図の広い範囲で出現することや、カイラル秩序相には、エネルギー・ギャップやストリング秩序の有無によって区別される複数のタイプのものが存在することがわかった。

1 Introduction

近年、1次元量子スピン系におけるカイラル秩序相の研究が精力的に行われている。このカイラル秩序相とは、スピンの古典的ならせん秩序は無しに、最近接スピン間のカイラリティのみが長距離秩序しているような相であり、以下のような秩序パラメータ

$$O_\kappa = \frac{1}{L} \sum_l \kappa_l \neq 0, \quad (\kappa_l = S_l^x S_{l+1}^y - S_l^y S_{l+1}^x = [\vec{S}_l \times \vec{S}_{l+1}]_z) \quad (1)$$

$$\vec{m}(q) = \frac{1}{L} \sum_l \vec{S}_l e^{iq_l} = 0 \quad (\text{for } \forall q) \quad (2)$$

で定義される。(ここで、 \vec{S}_l はサイト l における大きさ S のスピン演算子、 L は全スピン数。) カイラル秩序相では、系の時間反転、および並進対称性は保たれたままパリティ対称性のみが自発的に破れており、新しいタイプの量子秩序相として注目されている。このカイラル秩序相についてはこれまで、最近接、次近接スピン間に異方的な反強磁性的相互作用をもつ量子スピン鎖 (J_1 - J_2 XXZ 鎖) における研究がなされており、解析的 [1, 2]、数值的 [3] 手法により、その存在が示されている。また、カイラル秩序相には、エネルギー・ギャップの有無により区別される、いわゆるギャップレス・カイラル相とギャップド・カイラル相の2種類があることもわかっている。

カイラル秩序相の出現には、フラストレーションによるらせん構造の形成と、異方性による対称性の低下が本質的であると考えられる。異方性のために、系の対称性が $SU(2)$ から $U(1) \times Z_2$ に落ち、この Z_2 すなわちパリティ対称性の破れが、カイラル秩序を引き起こすわけである。我々は、この異方性の起源を1イオン型異方性に求め、D項をもつ $S = 1$ J_1 - J_2 ハイゼンベルグ鎖、

$$\mathcal{H} = \sum_{\rho=1,2} J_\rho \sum_l \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+\rho} + D \sum_l (S_l^z)^2 \quad (3)$$

の基底状態におけるカイラル秩序相の研究を行った。具体的には、密度行列繰り込み群法 (DMRG) を用いた数値計算により、 $j \equiv J_2/J_1 \geq 0$ 、 $d \equiv D/J_1 > 0$ での、系の基底状態相図を決定している。

2 Method

今回扱った $S = 1$ 鎖 (3) では、上記のカイラル、ヘリカル秩序に加えて、いわゆるハルデン相を特徴付ける秩序パラメータであるストリング秩序が、重要な役割を果たすことが知られている。今回我々は、そのカイラル、ヘリカル、ストリング秩序パラメータにそれぞれ対応した相関関数、

$$C_\kappa(r) = \langle \kappa_{l_0-r/2} \kappa_{l_0+r/2} \rangle, \quad (4)$$

$$C_s^\alpha(r) = \langle S_{l_0-r/2}^\alpha S_{l_0+r/2}^\alpha \rangle, \quad (\alpha = x, z) \quad (5)$$

$$C_{\text{str}}(r) = \langle S_{l_0-r/2}^z \exp \left(\sum_{j=l_0-r/2}^{l_0+r/2-1} i\pi S_j^z \right) S_{l_0+r/2}^z \rangle \quad (6)$$

(l_0 はスピン鎖の中央のサイト: $l_0 = (L+1)/2$ ($r = \text{even}$), $l_0 = (L+1)/2$ ($r = \text{odd}$))

を計算し、その長距離での振る舞いから各秩序の有無を判定することで、モデル (3) の基底状態相図を作成した。計算には、infinite-system DMRG algorithm [4] を用いている。

3 Result

図 1 に得られたモデル (3) の基底状態相図を、表 1 に各相における相関関数の振る舞いを、それぞれ示す。これらの図、表より、カイラル秩序相が j - d 平面の広い範囲で出現すること、カイラル秩序相にはギャップレス・カイラル相、カイラル・ハルデン相、カイラル LD 相 (LD は large-D の意) の 3 種類が存在することがわかる。以下で、ハルデン相とカイラル相間、および、LD 相とカイラル相間の相転移について、詳しく述べる。

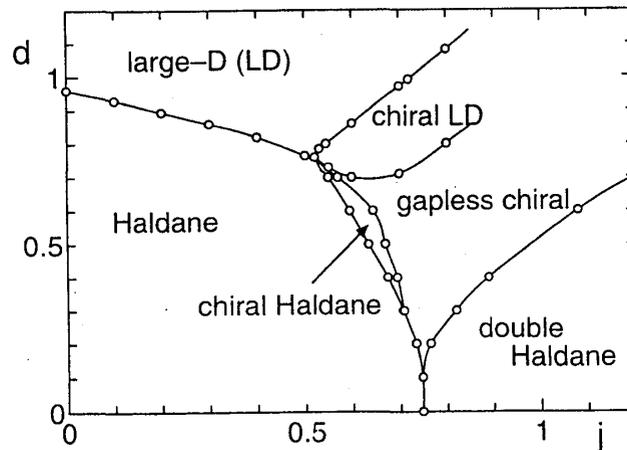


図 1: モデル (3) の基底状態相図。

表 1: 各相におけるカイラル、ストリング、スピン相関関数の長距離での振る舞い。“LRO”、“expo.”、“power” は、それぞれ長距離秩序、指数関数的減衰、冪関数的減衰の意。

	Haldane	chiral Haldane	gapless chiral	LD	chiral LD	double Haldane
C_κ	expo.	LRO	LRO	expo.	LRO	expo.
C_{str}	LRO	LRO	power	expo.	expo.	expo.
C_s^x	expo.	expo.	power	expo.	expo.	expo.

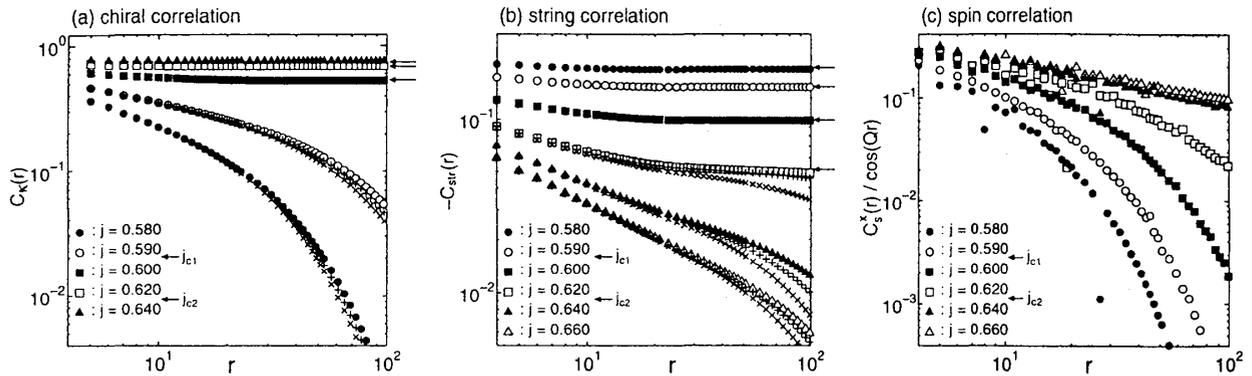


図 2: $d = 0.6$ における (a) カイラル、(b) スtring、(c) スピンの各相関関数の距離依存性。スピン相関は leading oscillating factor $\cos(Qr)$ で割ったものをプロットしている。DMRG の truncation error が symbol size より大きな場合には、より kept state の数 m が小さい計算のデータを、十字で示している。矢印は $r \rightarrow \infty$ での外挿値。

まず、ハルデン-カイラル相転移について考える。図 2 に、 d を 0.6 に固定し、様々な j に対して計算した各相関関数を示す。図 2 (a) から、カイラル相関の振る舞いが、 j が大きくなるにつれて、指数関数的減衰から長距離秩序へと変化していることがわかる。この転移点は $j = j_{c1} = 0.595 \pm 0.005$ と見積もられる。一方、図 2 (b)、(c) からは、String、スピンの両相関関数の振る舞いが、 $j = j_{c2} = 0.630 \pm 0.010$ で、それぞれ長距離秩序から冪関数的減衰へ、また、指数関数的減衰から冪的減衰へと変化していることが見てとれる。ここで注目すべきは、 j_{c2} の値が j_{c1} に比べて有意に大きいことである。このことは、 $j = 0.600$ で、カイラル、String の両相関がはっきりと長距離秩序を示していることから明らかである。以上より、 j が大きくなるにつれて、系は、まず $j = j_{c1}$ で、ハルデン相 (String 相関のみ長距離秩序) から “カイラル・ハルデン相” (カイラル、String 秩序が共存) へ、さらに $j = j_{c2}$ でギャップレス・カイラル相 (カイラル相関のみ長距離秩序) へと、2 段階の転移を起す事がわかる。 $j_{c1} < j < j_{c2}$ ではスピン相関が指数関数的に減衰していることから、中間相であるカイラル・ハルデン相は、系がエネルギー・ギャップをもつギャップド・カイラル相の一種であると考えられる。

次に、LD - カイラル相転移について述べる。図 3 に、 $j = 0.7$ で、 d の値を変えて計算した各相関関数のデータを示す。図 3 (a) に見られるように、カイラル相関は d が小さくなるにつれて、 $d = d_{c1} = 0.97 \pm 0.01$ で、指数関数的減衰から長距離秩序へと、振る舞いを変化させていることがわかる。一方、図 3 (b)、(c) は、String、スピン両相関関数の振る舞いが、 $d = d_{c2} = 0.70 \pm 0.08$ で、指数関数的減衰から冪的減衰へと変化することを示している。ここでも d_{c2} の値は d_{c1} に比べて明らかに小さいことから、系は d が小さくなるにつれて、まず $d = d_{c1}$ で LD 相 (全相関が指数関数的に減衰) から “カイラル LD 相 (カイラル秩序あり、スピン、String 相関は指数関数的減衰) へ、その後 $d = d_{c2}$ でギャップレス・カイラル相へと 2 段階で相転移することがわかる。この中間相である “カイラル LD 相” では、系はエネルギー・ギャップをもつと考えられるが、

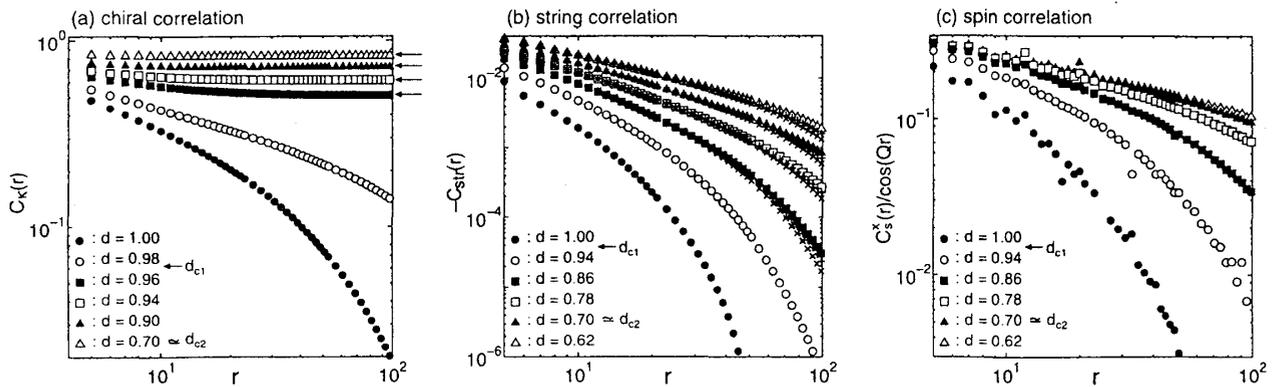


図 3: $j = 0.7$ における (a) カイラル、(b) スtring、(c) スピンの各相関関数の距離依存性。図の書式は、図 2 と同様。

String 秩序が存在しないことから、この相はカイラル・ハルデン相とは異なる、もう一つのタイプのギャップド・カイラル相であると考えられる。

4 Conclusion

我々は、DMRG を用いた数値計算により、1 イオン型異方性をもつ $S = 1$ J_1 - J_2 ハイゼンベルグ鎖 (3) の基底状態相図を決定した (図 1)。その結果、相図中の広い範囲で、カイラル秩序相が出現することが示された。また、カイラル秩序相には、系のエネルギー・ギャップの有無により区別される、ギャップド・カイラル相とギャップレス・カイラル相の 2 つのタイプがあり、さらにギャップド・カイラル相にも、カイラル・ハルデン相 (String 秩序有り)、カイラル LD 相 (String 秩序無し) の 2 種類が存在することがわかった。

参考文献

- [1] A. A. Nersesyan, A. O. Gogolin and F. H. L. Eßler, Phys. Rev. Lett. **81** (1998), 910; P. Lecheminant, T. Jolicoeur and P. Azaria, cond-mat/0007138.
- [2] A. Kolezhuk, cond-mat/0003427.
- [3] M. Kaburagi, H. Kawamura and T. Hikihara, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999), 3185; T. Hikihara, M. Kaburagi, H. Kawamura and T. Tonegawa, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000), 250.
- [4] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).