

フラストレートしたスピラダーでの磁場誘起スピンギャップ

姫路工大理学部 岡崎 暢寿¹, 坂井 徹
東京工大院理工 岡本 清美

我々は、次近接相互作用と次々近接相互作用のある $S = 1/2$ スピラダーの磁化過程を縮退のある摂動論や有限個のクラスターの数値対角化で調べた。数値対角化データの解析には、共型場理論に基づく有限サイズスケールリングおよびレベルスペクトロスコピー等を用いている。その結果、磁化曲線の飽和値の半分のところに磁場誘起スピンギャップが存在する場合があること、及びその機構には 2 種類のものがあることを示すことができた。

磁性イオンが梯子状に結合したスピラダー系は、低次元の強い量子効果のため反強磁性的な長距離秩序がなく、磁気励起スペクトルにスピンギャップと呼ばれるエネルギーギャップ [1, 2, 3] が出現することで知られている。実際の物質でスピンギャップ系としては、 SrCu_2O_3 がある。このようなスピンギャップ系では、単純な近接イオン間の相互作用だけを考慮したハイゼンベルグ模型に基づく磁化過程の理論的解析によると、スピンギャップは臨界磁場で消失し、ギャップレスの状態が続いた後、飽和磁化に達する。また、ホールをドーピングした系 $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ [4] では超伝導が観測されているが、その超伝導発現機構においてもスピンギャップが重要な役割を果たしていると考えられる。

近年、この磁化過程でスピンギャップが消失したあと、さらに強い磁場をかけることにより新たなスピンギャップが磁化がゼロ以外のところに誘起されて磁化の量子化が起こり、磁化曲線にプラトー [5, 6, 7, 8, 9] が現れる現象が注目されている。

この磁化の量子化条件 [10] は

$$Q(S - m) = \text{integer} \quad (1)$$

(Q : 基底状態の周期、 S : 単位胞あたりの全スピン、 m : 単位胞あたりの磁化、今の場合は単位胞は梯子で結ばれた 2 スピン) で表され、この条件を満たすと磁場によってスピンギャップが誘起され、磁化曲線にプラトーが生じる可能性がある。我々は、これまでプラトーのないと考えられていた $S = 1/2$ スピラダーに次近接相互作用と次々近接相互作用を入れることによってこの系をフラストレートさせ、並進対称性が自発的に破れて 2 倍周期構造になって磁化曲線の $m = 1/2$ でプラトーが出現する可能性を検討した。

我々のモデルは Fig.1 のようなものであり、ハミルトニアンは次のように書くことができる。

¹E-mail:nobuhisa@sci.himeji-tech.ac.jp

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_Z \\ \hat{H}_0 &= J_1 \sum_i^L (S_{1,i} \cdot S_{1,i+1} + S_{2,i} \cdot S_{2,i+1}) \\ &+ J_{\perp} \sum_i^L S_{1,i} \cdot S_{2,i} \\ &+ J_2 \sum_i^L (S_{1,i} \cdot S_{2,i+1} + S_{2,i} \cdot S_{1,i+1}) \\ &+ J_3 \sum_i^L (S_{1,i} \cdot S_{1,i+2} + S_{2,i} \cdot S_{2,i+2}) \end{aligned}$$

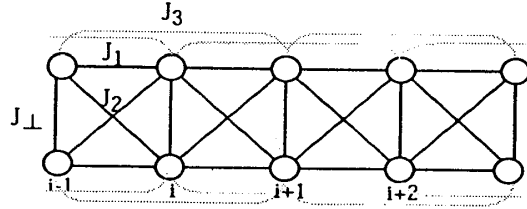


Fig. 1. 次近接相互作用と次々近接相互作用のある $S = 1/2$ スピラダー。

$$\hat{H}_Z = -H \sum_i^L (S_{1,i}^z + S_{2,i}^z)$$

今回、我々は $J_{\perp} = 1$ と固定した。また、 \mathcal{H}_Z はゼーマン項のエネルギーで、 $\sum_i (S_{1,i}^z + S_{2,i}^z) = M$ は保存量である。サイズ L (単位胞の数)、 $\sum_i (S_{1,i}^z + S_{2,i}^z) = M$ 、波数 k の最低エネルギー固有値を $E_0(L, M, k)$ として、有限個のクラスターの厳密対角化とサイズスケールリング [11, 12] によって解析を行なった。ここで、単位胞あたりの磁化は $m = M/L$ と表される。

まず、 $J_1, J_2, J_3 \ll 1$ [13] である強結合極限において、縮退のある摂動論で議論を行なう。 $J_1 = J_2 = J_3 = 0$ では、 $m = 1/2$ のとき、単位胞の半数が $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ 、残りの半数が $|\uparrow\uparrow\rangle$ である。これらを擬スピン T の $|\downarrow\rangle$ と $|\uparrow\rangle$ で表現し、この2状態だけに状態空間を制限した場合の有効ハミルトニアンを求めると、 J_1, J_2, J_3 の最低次で

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &= (J_1 - J_2) \sum_i^L (T_i^x \cdot T_{i+1}^x + T_i^y \cdot T_{i+1}^y) + \frac{J_1 + J_2}{2} \sum_i^L (T_i^z \cdot T_{i+1}^z) \\ &+ J_3 \sum_i^L (T_i^x \cdot T_{i+2}^x + T_i^y \cdot T_{i+2}^y) + \frac{J_3}{2} \sum_i^L (T_i^z \cdot T_{i+2}^z). \end{aligned} \quad (2)$$

となり、次近接相互作用のある $T = 1/2$ の XXZ 模型のゼロ磁場基底状態問題と等価であることがわかる。 $J_2 = J_3 = 0$ では T 描像で基底状態はスピン液体状態 (S 描像でギャップレス、プラトーなし) である。次近接相互作用 J_2 を大きくすることによって Ising 的異方性が大きくなり、 $J_2 \geq (1/3)J_1$ (この臨界値は $J_3 = 0$ のとき) となったときに、 T 描像でネール相に Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [14, 15] 転移して、2倍周期構造になることがわかる。また、次々近接相互作用 J_3 を大きくすることによって擬スピン描像でダイマー相に BKT 転移してやはり2倍周期構造になることがわかる。ネール状態もダイマー状態も S 描像でプラトー状態であるが、その機構は互いに異なる。これらをプラトー A (次近接相互作用, ネールの) とプラトー B (次々近接相互作用, ダイマー的) と名付けよう。

具体的なプラトー条件を求めるために、我々は数値対角化を行い、レベルスペクトロスコピー [16] を用いて解析した。このレベルスペクトロスコピーは1次元量子系での BKT 転移点を対角化数値データから決める最も精度の高い方法であり、いくつかの低励起エ

エネルギーのレベルクロスから転移点を決定するものである [16]。

今の場合、関係する低励起は

$$\Delta_1 = \frac{1}{2} \left\{ E_0 \left(L, \frac{L}{2} + 1, \pi \right) + E_0 \left(L, \frac{L}{2} - 1, \pi \right) \right\} - E_0 \left(L, \frac{L}{2}, 0 \right) \quad (3)$$

$$\Delta_{0A} = E_{0A} \left(L, \frac{L}{2}, \pi \right) - E_0 \left(L, \frac{L}{2}, 0 \right) \quad (4)$$

$$\Delta_{0B} = E_{0B} \left(L, \frac{L}{2}, \pi \right) - E_0 \left(L, \frac{L}{2}, 0 \right) \quad (5)$$

の3つで (E_{0A} と E_{0B} は空間反転対称性が違う)、ギャップレス相では Δ_1 が、プラトー A 相では Δ_{0A} が、プラトー B 相では Δ_{0B} が、それぞれ最低励起となっている。したがって、これらの最低励起が入れ代わる点が相境界になる。

$J_1 = 0.4$ と固定した場合の J_2 と J_3 平面における相図を Fig.2 に示す。 $J_3 = 0$ のとき $J_2 = 0.16$ でギャップレス 1 相からプラトー A 相に BKT 転移している。これは有効ハミルトニアン (2) 式より、 $J_1 \rightarrow 0$ の極限のとき、 J_2 が $J_1/3$ のときにギャップレス 1 相からプラトー A 相に BKT 転移することを解析した結果 [17] にほぼ一致していることがわかる。また、 $J_2 = 0$ のとき $J_3 = 0.12$ でギャップレス 1 相からプラトー B 相に BKT 転移している。よって、次近接相互作用を入れることにより出現するプラトー A 相より次々近接相互作用を入れることにより出現するプラトー B 相の方がプラトーが出現しやすいことがわかる。さらに、 $J_2 > 0.11$ のプラトー A 相に J_3 を入れていくとプラトー B 相に Gaussian 転移することもわかった。 $J_2 = 0.3$ のときの $J_3 = 0, 0.10, 0.15, 0.20$ の 4 点での磁化曲線を Fig.3 に示す。まず、 $J_3 = 0$ のときはプラトー A が出現しているが $J_3 = 0.10$ のときには次々近接相互作用が強くなってプラトーの幅が狭くなったのがわかる。さらに相境界に対応する $J_3 = 0.15$ では完全にギャップレスになっており、 $J_3 = 0.20$ では次々近接相互作用によるプラトー B が出現していることがわかる。このことより、プラトー A とプラトー B がまったく異なる機構 [18] によって生じていることがわかり、実効ハミルトニアン

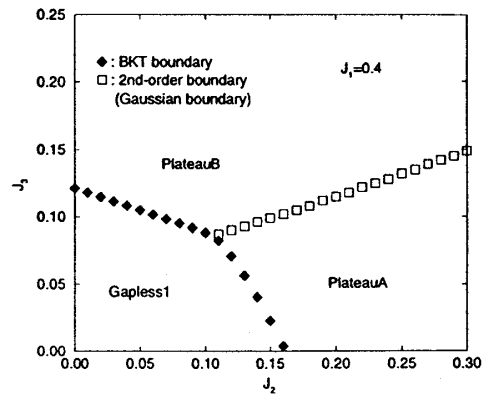


Fig. 2. 磁化 $m=1/2$ のとき、 $J_1=0.4$ で、 J_2 と J_3 の値を変えたときの相図。

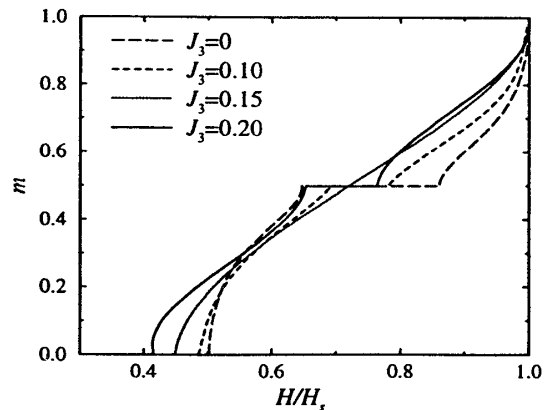


Fig. 3. $J_1=0.4, J_2=0.3$ で $J_3=0, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ のときの磁化曲線。

から得られる結論と符合している。

以上のことより、 $S = 1/2$ のスピンラダーに次近接相互作用と次々近接相互作用を入れることによって、並進対称性が自発的に破れて2倍周期構造になり、磁化曲線の飽和磁化の半分のところにプラトーが出現する場合があることがわかった。また、プラトーには機構が2種類あり、次近接相互作用によるプラトー A より、次々近接相互作用によるプラトー B の方が出現しやすいことも示された。以前の我々の解析により、プラトー A は $J_{\parallel} < J_{\perp}$ の場合にしか現れないことがわかっている。SrCu₂O₃ [19] では、 $J_{\parallel} \sim 2J_{\perp}$ と考えられるので、この系でプラトーが出現するとすれば、次々近接相互作用によるプラトー B である。しかし、SrCu₂O₃ は結合定数 J が非常に大きいため、プラトーが現れる臨界磁場も大きく、現状の技術では観測ができない状況である。もっと J の小さいスピンラダー系の合成に期待したい。

参考文献

- [1] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991) 1347 .
- [2] E. Dagotto, J. Riera and D. Scalapino: Phys. Rev. B **45** (1992) 5744.
- [3] M. Troyer, H. Tsunetsugu and T. M. Rice: Phys. Rev. B **53** (1996) 251.
- [4] M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Mori and K. Kinoshita: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 2764.
- [5] D. C. Cabra, A. Honecker and P. Pujol: Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 5126.
- [6] D. C. Cabra and M. D. Grynberg: Phys.Rev.Lett.**82** (1999) 1768.
- [7] K. Totsuka: Phys.Rev.B**57** (1998) 3435.
- [8] T. Tonegawa, *et al.*: Physica. **B246-247** (1998) 509.
- [9] T. Tonegawa, K. Okamoto and M. Kaburagi: in preparation
- [10] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck: Phys.Rev.Lett. **78** (1997) 1984.
- [11] T. Sakai and M. Takahashi: Phys.Rev.B **57** (1998) R3201.
- [12] N. Okazaki, J. Miyoshi and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 37.
- [13] F. Mila: Eur. Phys. J. **B6** (1998) 201.
- [14] V. L. Berezinski: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **59** (1970) 907; Sov. Phys. JETP **32** (1971) 493.
- [15] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless: J.Phys.C **6** (1973) 1181
- [16] K. Nomura and K. Okamoto: J. Phys. A: Math. Gen. **27** (1994) 5773.
- [17] K. Okamoto: in preparation.
- [18] N. Okazaki, K. Okamoto and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 2419.
- [19] M. Azuma, *et al.*: Phys. Rev. Lett **73** (1994) 3463.