

Spin-chirality duality in a spin ladder system with four-spin cyclic exchange

引原 俊哉¹, 桃井 勉^a, 胡 暁

物質・材料研究機構、筑波大物理^a

4スピン循環相互作用を持つ $S = 1/2$ 2本鎖梯子系の基底状態について調べた。我々は、反強磁性秩序とベクトル・カイラリティ秩序を入れ替える厳密な双対変換を導入し、あるパラメータ点において、系は自己双対であることを確かめた。さらに、密度行列繰り込み群法を用いた数値計算から、4スピン循環相互作用が大きな領域では、ベクトル・カイラリティ相関が支配的な新奇な状態が実現されることが分かった。

1 Introduction

近年、銅酸化物2本鎖梯子系 $\text{La}_x\text{Ca}_{14-x}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ [1] 及び、正方格子系 La_2CuO_4 [2] に対する研究から、これらの系においては、通常の2スピン交換相互作用に加え、4スピン循環相互作用が重要な役割を果たしていることがわかってきた。4スピン循環相互作用とは、4スピンが作るブラケットのスピンの状態を循環置換するものであり (図1(a))、スピン演算子を用いて、

$$K_l = \mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l} + \mathbf{s}_{1,l+1} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1} + \mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{1,l+1} + \mathbf{s}_{2,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1} + \mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1} + \mathbf{s}_{2,l} \cdot \mathbf{s}_{1,l+1} \\ + 4(\mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l})(\mathbf{s}_{1,l+1} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1}) + 4(\mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{1,l+1})(\mathbf{s}_{2,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1}) - 4(\mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1})(\mathbf{s}_{2,l} \cdot \mathbf{s}_{1,l+1}) \quad (1)$$

のように表される。この循環相互作用は、³He 固体 [3] や Wigner 固体 [4] などでも重要であることが知られている。しかし、この循環相互作用の効果については、それ自身が多くの項を複雑な形で含んでいることもあり、未知の部分が多く残されている。特に、循環相互作用が量子スピン系においてどのような磁気秩序を引き起こす傾向を持つか、という基本的な問題でさえ、あまりよく分かっていないのが現状である。

今回我々は、4スピン循環相互作用を含む $S = 1/2$ 2本鎖梯子系に着目し、その効果について

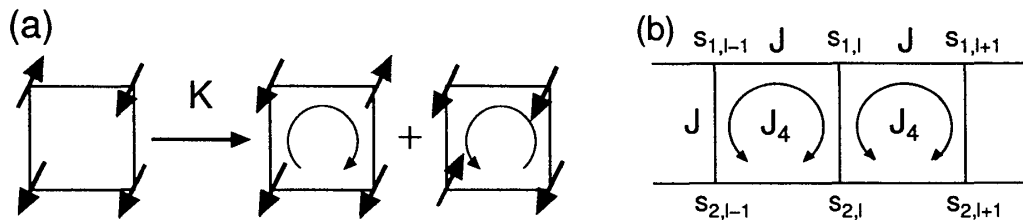


図 1: (a) 4スピン循環相互作用の効果。ブラケット上にある4スピンの状態を時計回り、反時計回りに循環させる。(b) ハミルトニアン (2) の模式図。

¹ E-mail: HIKIHARA.Toshiya@nims.go.jp

調べた。まず我々は、系の反強磁性 (AF) 秩序とベクトル・カイラリティ (VC) 秩序との間に、厳密な双対変換が成り立つことを発見した。さらに、この双対変換と、密度行列繰り込み群法を用いた数値計算により、4 スピン循環相互作用は、VC 自由度を誘起する傾向を持つことを確かめた。

2 Two-leg ladder with four-spin cyclic exchange

2.1 model Hamiltonian

4 スピン循環相互作用を含む $S = 1/2$ 2 本鎖梯子系として、以下のようなハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \sum_l \{J \mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l} + J(\mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{1,l+1} + \mathbf{s}_{2,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1}) + J_4 K_l\} \quad (2)$$

を考える。この系は、4 スピン循環相互作用定数 J_4 が小さい場合 ($J_4/J \lesssim 0.3$) には、AF 秩序が支配的な disordered 相、いわゆる Resonating-Valence-Bond (RVB) 相に属していることが知られている [5]。スピン演算子を用いて K_l を書き直すと、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & (J + 2J_4) \sum_l \mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l} + (J + J_4) \sum_l \sum_{\mu=1,2} \mathbf{s}_{\mu,l} \cdot \mathbf{s}_{\mu,l+1} \\ & + J_4 \sum_l (\mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1} + \mathbf{s}_{1,l+1} \cdot \mathbf{s}_{2,l}) \\ & + 4J_4 \sum_l (\mathbf{s}_{1,l} \cdot \mathbf{s}_{2,l})(\mathbf{s}_{1,l+1} \cdot \mathbf{s}_{2,l+1}) + 4J_4 \sum_l (\mathbf{s}_{1,l} \times \mathbf{s}_{2,l}) \cdot (\mathbf{s}_{1,l+1} \times \mathbf{s}_{2,l+1}) \end{aligned} \quad (3)$$

の様にとまとめられる。ここで興味深いのは、4 スピン循環相互作用から、VC 間相互作用項 (式 (3) 最後の項) が出てくることである。この項だけをみれば、4 スピン循環相互作用は VC 秩序を引き起こす傾向を持つことが期待される。以下で、 J_4 の増加とともに、実際に VC 自由度が支配的な状態が実現されることを示す。

2.2 Spin-chirality duality transformation

ここでは、スピン自由度と VC 自由度の関係を明らかにするため、両者の間に成り立つ双対変換を導入する。まず、各 rung 上の演算子 $\mathbf{W}_l \equiv \mathbf{s}_{1,l} + \mathbf{s}_{2,l}$ 及び $\mathbf{V}_l \equiv 2 \mathbf{s}_{1,l} \times \mathbf{s}_{2,l}$ の間の交換関係を考える。パウリ行列が満たす関係式を用いると、交換関係は直ちに求まり、

$$[W_l^\alpha, W_l^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} W_l^\gamma \delta_{l,l'}, \quad [V_l^\alpha, V_l^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} V_l^\gamma \delta_{l,l'}, \quad [W_l^\alpha, V_l^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} V_l^\gamma \delta_{l,l'} \quad (4)$$

となることが分かる。これを見ると、演算子 \mathbf{V}_l はリー代数として閉じておらず、 \mathbf{W}_l 、 \mathbf{V}_l 両者が互いに混ざり合っている。ここで、新しい演算子として、

$$\mathbf{S}_l \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{W}_l - \mathbf{V}_l) = \frac{1}{2} (\mathbf{s}_{1,l} + \mathbf{s}_{2,l}) - \mathbf{s}_{1,l} \times \mathbf{s}_{2,l}, \quad (5)$$

$$\mathbf{T}_l \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{W}_l + \mathbf{V}_l) = \frac{1}{2} (\mathbf{s}_{1,l} + \mathbf{s}_{2,l}) + \mathbf{s}_{1,l} \times \mathbf{s}_{2,l} \quad (6)$$

を導入する。すると、これらの演算子の交換関係は、

$$[S_l^\alpha, S_l^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_l^\gamma \delta_{l,l'}, \quad [T_l^\alpha, T_l^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} T_l^\gamma \delta_{l,l'}, \quad [S_l^\alpha, T_l^\beta] = 0, \quad (7)$$

となり、さらに $S_i^2 = T_i^2 = 3/4$ であることに注意すると、 S_i, T_i それぞれが独立に、 $S = 1/2$ スピン演算子となっていることが分かる。こうして、元のスピ演算子 $(s_{1,i}, s_{2,i})$ から新たなスピ演算子 (S_i, T_i) への変換が定義できた。新旧演算子間の関係は、以下のようにまとめられる。

$$\begin{aligned} s_{1,i} + s_{2,i} &= S_i + T_i, & s_{1,i} \cdot s_{2,i} &= S_i \cdot T_i \\ -2 s_{1,i} \times s_{2,i} &= S_i - T_i, & s_{1,i} - s_{2,i} &= 2 S_i \times T_i, \end{aligned}$$

これを見ると、上記の双対変換は、rung 上のスピ演算子の和、内積はそのまま、スピンの差 (AF 秩序) と外積 (VC 秩序) を入れ替えていることがわかる。

2.3 self-dual point and ground-state phase diagram

ハミルトニアン (3) に、前節で述べたスピ・カイラリティ双対変換を施すと、以下の様なデュアル・ハミルトニアン

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= (J + 2J_4) \sum_l S_l \cdot T_l + \left(\frac{J}{2} + 2J_4 \right) \sum_l (S_l \cdot S_{l+1} + T_l \cdot T_{l+1}) \\ &+ \frac{J}{2} \sum_l (S_l \cdot T_{l+1} + T_l \cdot S_{l+1}) \\ &+ 4J_4 \sum_l (S_l \cdot T_l) (S_{l+1} \cdot T_{l+1}) + 2J \sum_l (S_l \times T_l) \cdot (S_{l+1} \times T_{l+1}). \end{aligned} \quad (8)$$

が得られる。この式 (8) と元の式 (3) を見比べると、双対変換により各項の係数は変化しているが、ハミルトニアンの形は不変に保たれていることがわかる。さらに注目すべきは、 $J_4 = J/2$ の場合に、系のハミルトニアンが、双対変換により自分自身に変換されることである。この自己双対性から、この点では、系の AF 秩序と、VC 秩序が全く同じ様に振る舞うことが直ちに示される。さらに、双対変換は AF 秩序と VC 秩序を入れ替えることを考え合わせると、 J_4 が小さいときに、系は AF 秩序が支配的な状態にあるのに対し、 J_4 が自己双対点を越えて十分大きくなると、系は VC 秩序が支配的な状態を示すようになる、という予想をたてることができる。

この予想を確かめるため、我々は密度行列繰り込み群法 [6] を用いた数値計算を行い、系の基底状態における AF 相関関数、及び、VC 相関関数

$$C_{AF}(|l-l'|) = \frac{(-1)^{l-l'}}{4} \langle (s_{1,l}^z - s_{2,l}^z)(s_{1,l'}^z - s_{2,l'}^z) \rangle \quad (9)$$

$$C_{VC}(|l-l'|) = (-1)^{l-l'} \langle (s_{1,l} \times s_{2,l})^z (s_{1,l'} \times s_{2,l'})^z \rangle \quad (10)$$

の振る舞いを調べた。結果を図 2 に示す。この図をみると、 J_4 が小さいときには AF 相関関数が支配的であるのに対し [図 (a)]、 J_4 の増加とともに VC 相関が増大し、自己双対点で両者が完全に一致 [図 (b)] した後、 J_4 の大きな領域では、VC 相関関数が支配的になっている [図 (c)] ことがわかる。また、我々は系のエネルギー・ギャップについての解析も行い、 J_4 が大きい領域 ($J_4/J \gtrsim 2.5$) では、系は VC 相関が支配的な RVB 相、いわゆる“カイラリティ RVB 相”に属していることも発見している [7]。これらの結果から、4 スピン循環相互作用は、VC が支配的な状態を実現する傾向をもつと結論づけられる。

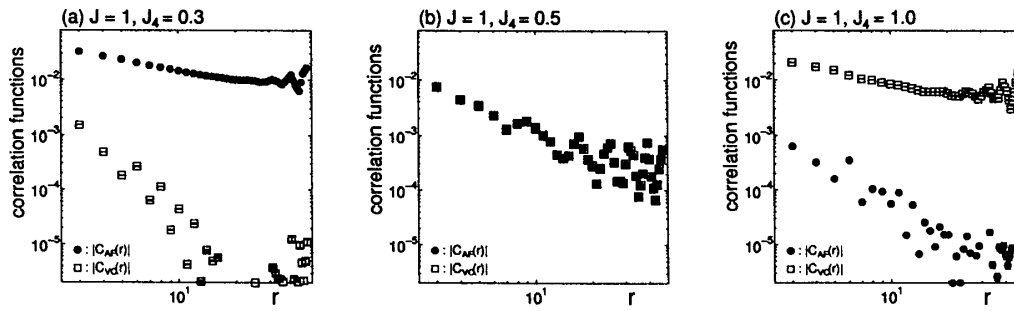


図 2: (a) $J_4/J = 0.3$ 、(b) $J_4/J = 0.5$ 、(c) $J_4/J = 1$ での AF 相関関数 (黒丸)、及び、VC 相関関数 (白四角)。

3 Conclusion

我々は、4 スピン循環相互作用 J_4 を持つ $S = 1/2$ 2 本鎖梯子系の基底状態について調べた。スピン・カイラリティ 双対変換を導入することで、系の AF 秩序と VC 秩序とが、密接に関係づけられることを明らかにした。また、双対変換と密度行列繰り込み群法を用いた数値計算から、 J_4 が大きくなると、VC が支配的な状態が実現されることを確かめた。

謝辞

有益な議論をしていただいた、谷口伸彦氏、田中秋弘氏、中村正明氏に感謝いたします。

参考文献

- [1] S. Brehmer *et al.*, Phys. Rev. B **60** (1999), 329; M. Matsuda *et al.*, Phys. Rev. B **62** (2000), 8903; K. P. Schmidt *et al.*, Europhys. Lett. **56** (2001), 877; T. S. Nunner *et al.*, cond-mat/0203472.
- [2] Y. Honda *et al.*, Phys. Rev. B **47** (1993), 11329; R. Coldea *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 5377.
- [3] M. Roger, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998), 1308.
- [4] T. Okamoto and S. Kawaji, Phys. Rev. B **57** (1998), 9097.
- [5] Y. Honda and T. Horiguchi, cond-mat/0106426; K. Hijii and K. Nomura, Phys. Rev. B **65**, (2002) 104413.
- [6] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [7] T. Hikihara, T. Momoi and X. Hu, cond-mat/0206102.