

量子スピン系におけるカイラル対称性の破れ

神戸大学 国際文化学部¹大阪大学 理学部²大阪大学 理学部³鏑 木 誠¹引原 俊哉²川 村 光³

競合量子スピン系における新しい秩序相「カイラル相」の存在を種々のスピン系で確認したので、その結果を報告する。対象とした系は、反強磁性的第2近接までの相互作用を持つ $S=1/2, 1, 3/2, 2$ XXZ 量子スピン鎖で、その秩序状態を数値的厳密対角化および密度行列繰り込み群によって調べた。その結果、「カイラル相」、即ち、カイラリティ $\kappa_i = S_i^x S_{i+1}^y - S_i^y S_{i+1}^x$ が長距離秩序となり、パリティを破る相が第2近接相互作用の大きい XY 領域で出現すること、そのカイラル相には、ギャップのある相（ギャップドカイラル相）とない相（ギャップレスカイラル相）が存在すること、ハイゼンベルグ領域ではカイラル相は出現しないこと、等が明らかになった。

フラストレートした量子スピン系におけるスピン秩序は多くの磁性研究者の興味を引いてきた。その理由は、フラストレーションと量子効果が相乗的に働くことによって、これらの系が多彩な磁氣的秩序を示すからである。本研究では、次式の XXZ ハミルトニアンで表されるフラストレートした異方的量子スピン鎖を対象とする。

$$\mathcal{H} = \sum_{\rho=1}^2 \left\{ J_{\rho} \sum_{\ell} (S_{\ell}^x S_{\ell+\rho}^x + S_{\ell}^y S_{\ell+\rho}^y + \Delta S_{\ell}^z S_{\ell+\rho}^z) \right\}, \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{S}_{\ell}$ は、サイト ℓ に付随する大きさ S のスピンオペレータ、 $J_{\rho} > 0$ は、第1近接 ($\rho=1$) および第2近接 ($\rho=2$) スピン間に働く反強磁性的交換相互作用、 Δ ($0 \leq \Delta \leq 1$) は交換相互作用の異方性を表すパラメータで、以下では $j=J_2/J_1$ とする。なお、 $\Delta=0$ および $\Delta=1$ は、それぞれ、 XY および ハイゼンベルグ鎖に対応する。

$S \rightarrow \infty$ の古典極限では、よく知られているように、系は磁氣的長距離秩序を持つ。この磁氣的秩序は

$$\vec{m}(q) = \frac{1}{LS} \sum_{\ell} \vec{S}_{\ell} e^{iq\ell}, \quad (2)$$

で表され (L は総スピン数)、 $j \leq 1/4$ ではネール型 ($q=\pi$)、 $j > 1/4$ では波数 $q=\cos^{-1}(-1/4j)$ で特徴付けられるヘリカル型である。 XY 模型の場合、ヘリカル型秩序相は、 $U(1)$ 対称性に対応した連続縮退の他にヘリックスの右および左廻りに対応した離散的2重縮退をもっている。この

¹E-mail:kabu@kobe-u.ac.jp²E-mail:hikihara@spin.ess.sci.osaka-u.ac.jp³E-mail:kawamura@spin.ess.sci.osaka-u.ac.jp

離散的縮退は、次式で定義されるカイラリティ κ の符号によって特徴付けられる [1]。

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{1}{LS} \sum_i \kappa_i, \\ \kappa_i &= S_i^x S_{i+1}^y - S_i^y S_{i+1}^x = [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}]_z,\end{aligned}\tag{3}$$

このカイラリティは、 $U(1)$ スピン回転と時間反転に対しては不変であるが、空間反転（パリティ）に対しては符号を変える。ハイゼンベルグ模型の場合、離散的カイラル縮退は存在しないが、形式的にはベクトルカイラリティ $\kappa_i = \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}$ の z -成分として Eq.(3) を用いる事ができる。なお、上に定義したカイラリティとハイゼンベルグスピン系でよく議論されるスカラーカイラリティ $\chi_i = \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}$ [2] は全く別物である。

一方、量子系 ($S < \infty$) の基底状態相図に対する研究も広範になされている。量子系における XY 模型およびハイゼンベルグ模型の場合、任意の j に対して磁気的長距離秩序が存在しないことは、厳密に証明されている [3]。 $S=1/2$ 系の場合は、数值的 [4, 5]、解析的 [6, 7] 研究により、 J_2 がある臨界値より小さい場合、即ち、 $j \equiv J_2/J_1 \leq j_c$ では、系は、ギャップレスで反強磁性的スピン相関が距離の冪で減衰するスピン流体相にあること、一方、 J_2 が臨界値より大きい場合、即ち、 $j > j_c$ では、系は、ギャップをもち 2 重縮退したダイマー相にあること、が明らかにされた。このダイマー相は、パリティおよび並進対称性を自発的に破っているが、時間反転の対称性は保っていると言う特徴を持っている。また、ハイゼンベルグ模型に対する臨界値 j_c は、 $j_c \approx 0.241$ [5] と見積もられている。この系では、磁気的長距離秩序は存在しないが、短距離秩序はリフシット点 j_L (ハイゼンベルグ模型では $j_L \approx 0.5$ [4]) で、その振る舞いを変える。即ち、 $j \leq j_L$ では、スピン構造因子 $S(q)$ は $q = \pi$ で最大となるが、一方、 $j > j_L$ では、系は $S(q)$ が j に依存した波数 $q = Q < \pi$ で最大値をとるヘリカル型短距離秩序を示す。最近、我々は、 $S=1/2$ XY 模型に対する $L = 20$ までの数值的厳密対角化法による Binder パラメータの解析から、この系でのカイラル相の存在に否定的な結論を出したが [8, 9]、これは Nersesyan 達のボゾン化法を用いた解析結果 [10] と合わない。この不一致に関しては、Aligia 達から、カイラル相を取り扱うには、 $L = 20$ では不十分であるとの指摘 [11] もあり、再検討を要する。

$S=1$ の場合、ダイマー相は出現せず [12, 13]、ハイゼンベルグ模型では、系はギャップをもつハルデン相にあり、 j の増加と共に $j = j_T \approx 0.744$ で、‘single-chain’ ハルデン相から ‘double-chain’ ハルデン相に 1 次の相転移を起こす [13]。他方、XY 模型に関しては、相転移の状況が完全には解明されていなかった。ボゾン化法による解析的研究 [14] は、 $j = 0$ におけるギャップレス相（いわゆる XY1 相）が、有限の $j < 0$ まで続いていることを示唆しているが、数值的研究 [15] は、ハルデン相が $j > 0$ まで安定に存在していることを示唆している。いずれにしても、 j が大きい所で、このような XY1 相またはハルデン相からの相転移の有無など解明されていなかった。最近、我々は XY 領域に近いところで、 j の増加と共に 2 つの逐次的相転移を行うことを密度行列繰り込み群 (DMRG) [16] を用いた数值的により示した [8, 9]。即ち、 j の増加と共に、 $j = j_{c1}$ でカイラル秩序を持たないハルデン相からギャップドカイラル相（カイラルハルデン相）へ、次に、 $j = j_{c2}$ でギャップドカイラル相からギャップレスカイラル相への 2 つの相転移である。

この研究では、Eq.(1) で表されるフラストレートした量子スピン鎖におけるカイラル秩序相に

着目して、 $S=1/2, 1, 3/2, 2$ の場合の基底状態に関する DMRG を用いた数値的解析を行い、 $j-\Delta$ 平面での相図を求める。方法は、文献 [8, 9] と同じもので、開放端鎖について、次式で定義される、カイラル相関関数 $C_\kappa(r)$ 、スピン相関関数 $C_s(r)$ 、ダイマー相関関数 $C_{\text{dim}}^x(r)$ ($S=1/2, 3/2$ の場合) または、ストリング相関 $C_{\text{str}}(r)$ ($S=1, 2$ の場合) を DMRG の方法で計算し、その距離依存性から相境界を求める。

$$C_\kappa(r) = \langle \kappa_{r_0-r/2} \kappa_{r_0+r/2} \rangle, \quad (4)$$

$$C_s(r) = \langle S_{r_0-r/2}^x S_{r_0+r/2}^x \rangle, \quad (5)$$

$$C_{\text{dim}}^x(r) = \langle S_{r_0-r/2}^x S_{r_0-r/2+1}^x \times (S_{r_0+r/2}^x S_{r_0+r/2+1}^x - S_{r_0+r/2+1}^x S_{r_0+r/2+2}^x) \rangle, \quad (6)$$

$$C_{\text{str}}(r) = \langle S_{r_0-r/2}^z (\exp i\pi \sum_{j=r_0-r/2+1}^{r_0+r/2-1} S_j^z) S_{r_0+r/2}^z \rangle, \quad (7)$$

ここで、 r_0 は開放端鎖の中心を表す。即ち、偶数 r に対しては $r_0=L/2$ 、奇数 r に対しては $r_0=(L+1)/2$ である。この計算では、パリティ偶、 $S_{\text{total}}^z=0$ の部分空間内で、 M ブロック状態 (但し、 $M \leq 400$) 無限系法を用いる。 M に関する収束性が十分であることを確認するまで M を増加させた。カイラル相、ダイマー相、ハルデン相では、それぞれ、カイラル相関関数 $C_\kappa(r)$ 、ダイマー相関関数 $C_{\text{dim}}^x(r)$ 、ストリング相関関数 $C_{\text{str}}(r)$ が、十分大きい r に対して一定になる。

参考までに、図 1 (a)-(c) に、 $S=1/2XY$ 模型のいくつかの j について計算したカイラル、ダイマーおよびスピン、相関関数の r -依存性を log-log プロットしたものである。大きい r での $C_\kappa(r)$ の振る舞い (図 1 (a)) は、 $j > j_{c1} \simeq 1.26$ でカイラル秩序が存在し、 $j < j_{c1}$ ではそれが消滅していることを明確に示している。

このようにして、相関関数の距離依存性から求めた $j-\Delta$ 平面での $S=1/2, 3/2, 2$ に対する基底状態相図を、図 2、図 3、図 4 に示す。 $(S=1$ については文献 [9] 参照。) いずれの場合もカイラル相が XY 領域で存在することが判明した。先に述べた $S=1/2$ の場合の不一致もこれによって解消した。また、 S が大きくなるに従って、量子効果で出現しているダイマー相領域、ハルデン相領域が小さくなって古典極限に近くなることも、図から読みとれる。詳細は近々適当な論文誌に発表する。

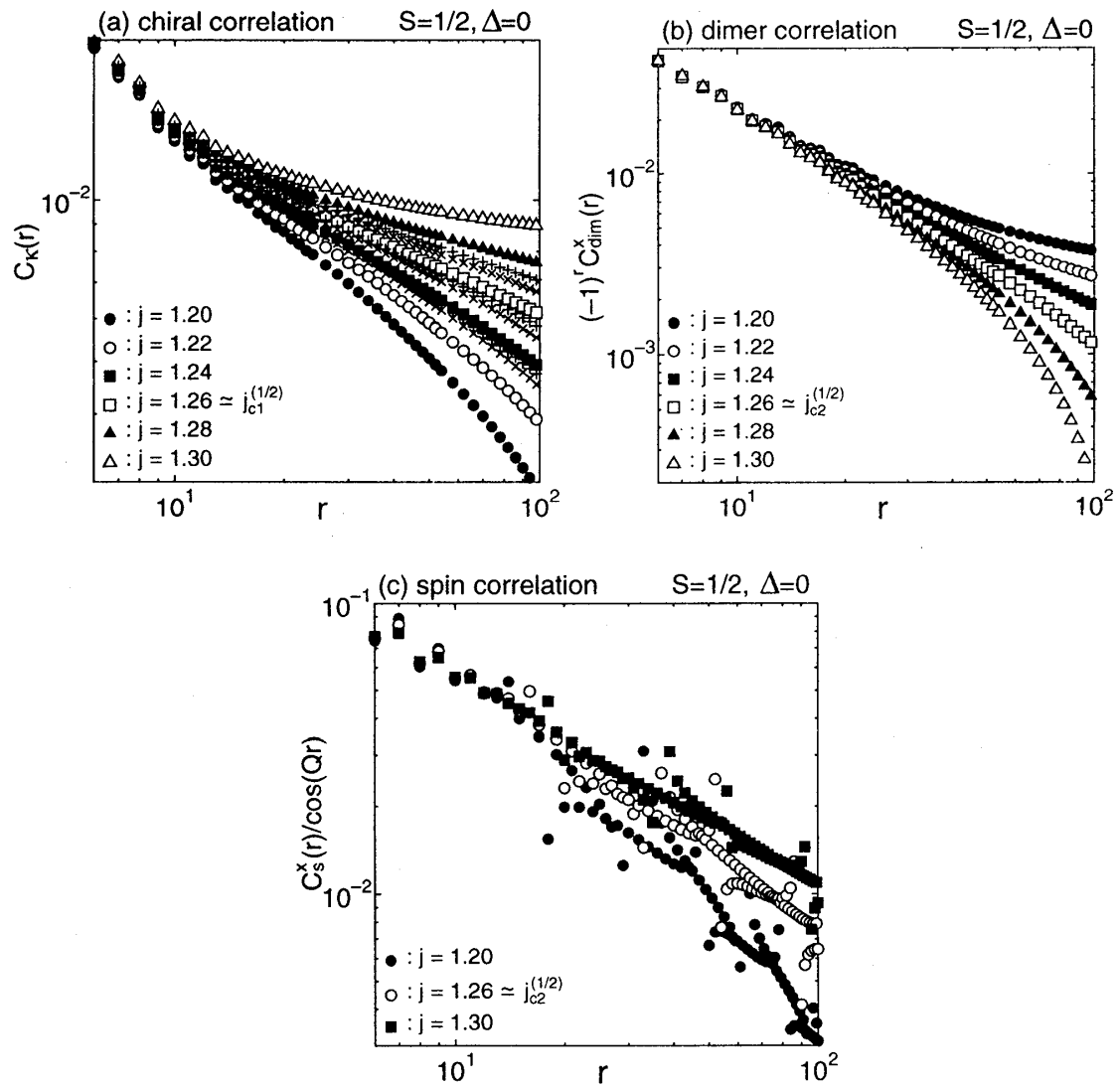


図 1: $S = 1/2$ XY ($\Delta = 0$) 模型における相関関数 and various j : (a) カイラル相関関数 $C_K(r)$; (b) ダイマー相関関数 $(-1)^r C_{\text{dim}}^x(r)$; (c) スピン相関関数 $C_s^x(r)/\cos(Qr)$.

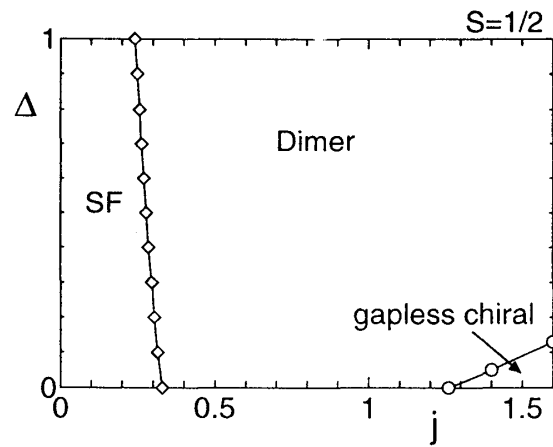


図 2: $S = 1/2$ に対する基底状態相図。

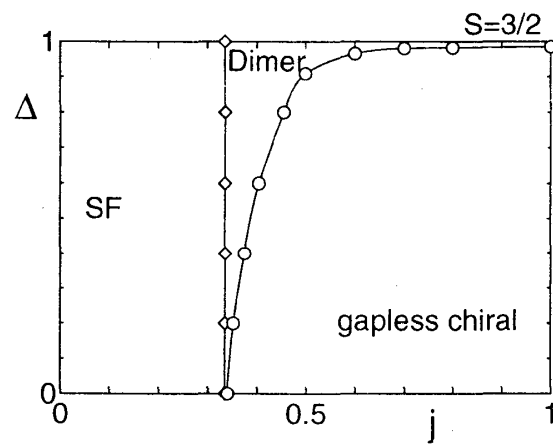


図 3: $S = 3/2$ に対する基底状態相図。

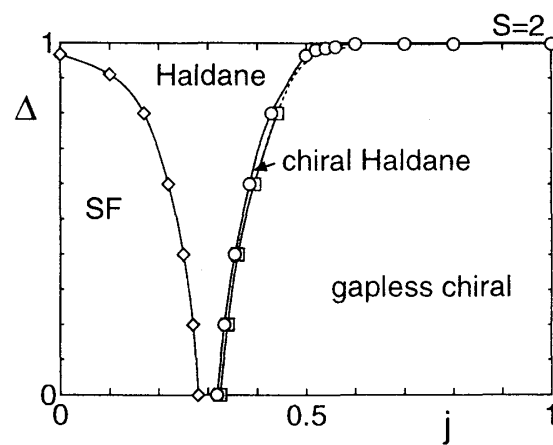


図 4: $S = 2$ に対する基底状態相図。

参考文献

- [1] H. Kawamura, Phys. Rev. B **38**, (1988) 4916.
- [2] H. Frahm and C. Rödenbeck, J. Phys. A **30**, (1997) 4467.
- [3] T. Momoi, J. Stat. Phys. **85**, (1996) 193.
- [4] T. Tonegawa and I. Harada, J. Phys. Soc. Jpn. **56**, (1987) 2153; T. Tonegawa, I. Harada, and M. Kaburagi, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, (1992) 4665.
- [5] K. Okamoto and K. Nomura, Phys. Lett. A **169**, (1992) 433; K. Nomura and K. Okamoto, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, (1993) 1123.
- [6] C.K. Majumder and D.K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, (1969) 1399.
- [7] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. B **25**, (1982) 4925.
- [8] M. Kaburagi, H. Kawamura and T. Hikihara, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 3185 (1999).
- [9] T. Hikihara, M. Kaburagi, H. Kawamura and T. Tonegawa, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 250 (2000)
- [10] A.A. Nersesyan, A.O. Gogolin and F.H.L. Eßler, Phys. Rev. Lett. **81**, (1998) 910.
- [11] A. A. Aligia, C. D. Batista and F. H. L. Eßler, cond-mat /0002318 (2000).
- [12] T. Tonegawa, M. Kaburagi, N. Ichikawa and I. Harada, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, (1992) 2890.
- [13] A. Kolezhuk, R. Roth and U. Schollwöck, Phys. Rev. Lett. **77**, (1996) 5142; Phys. Rev. B **55**, (1997) 8928.
- [14] H. Shimaoka and K. Kuboki, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, (1993) 3257.
- [15] T. Tonegawa, S. Suzuki and M. Kaburagi, J. Magn. Magn. Mater. **140-144**, (1995) 1613.
- [16] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, (1992) 2863; Phys. Rev. B **48**, (1993) 10345.