

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鎗 木 誠¹京都工芸繊維大学 工芸学部²川 村 光²神戸大学大学院 自然科学研究科^{1,3}引原 俊哉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 $S=1/2$ および 1 量子スピン鎖 (XY、ハイゼンベルグ模型) 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 $S=1$ 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、 $S=1$ ハイゼンベルグ領域および $S=1/2$ 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。

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

ここで、 S_{ℓ} 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、 λ ($0 \leq \lambda \leq 1$) は交換相互作用の異方性を表すパラメータ、である。 $\lambda=0$ および $\lambda=1$ は、それぞれ、XY および ハイゼンベルグ鎖に対応する。

$S=1/2$ 系の基底状態相図に対する研究は、数値的 [1, 2] にも解析的 [3, 4] にも広範になされてきた。これらの研究により、 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、 $j_c \cong 0.241$ [2] と見積もられている。この系では、磁氣的長距離秩序は存在しないが、短距離秩序はリフシツ点 j_L (ハイゼンベルグ模型では $j_L \cong 0.5$ [1]) で、その振る舞

¹E-mail:kabu@kobe-u.ac.jp²E-mail:kawamura@hie.kit.ac.jp³E-mail:hikihara@phys03.phys.sci.kobe-u.ac.jp

いを変える。即ち、 $j \leq j_L$ では、系は通常のネール型反強磁性短距離秩序を示し、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。

$S=1$ の場合、ダイマー相は出現せず [5, 6]、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 $j=j_T \simeq 0.744$ 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 [6]。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い。ボゾン化法による解析的研究 [7] 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、数値的研究 [8] 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未だに解明されていない。

$S \rightarrow \infty$ 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、 $j \leq 1/4$ ではネール型、 $j > 1/4$ 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 [9]。

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{1}{N} \sum_i \kappa_i, \\ \kappa_i &= S_i^x S_{i+1}^y - S_i^y S_{i+1}^x = [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}]_z,\end{aligned}\tag{2}$$

ここで、 N はスピンの総数である。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.(2) 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 $\chi_i = \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}$ [10] は全く別物である。

連続対称性をもつフラストレートした古典スピン系に対する最近の研究は、このようなカイラル自由度から、新しいユニバーサリティクラスの相転移を伴う新しい秩序 [11]、新しい多重点をもつ新奇な磁気相図 [11]、スピン秩序をもたずカイラリティのみが長距離秩序となる新たなカイラル相 [12, 13, 14]、など目新しい現象が出現することを示している。一方、フラストレートした量子スピン系における可能なカイラル秩序についての系統的な研究は未だなされていない。

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可能なカイラル秩序を調べる目的で、 $S=1/2$ および 1 の場合の基底状態に関する数値的解析を行う。結果は、カイラル長距離秩序をもつギャップレスまたはギャップドカイラル相が $S=1$ XY 模型の広い j の範囲で実現され、そこでは、スピン相関が幂関数的または指数関数的に減衰すること、 $S=1/2$ XY 模型および $S=1/2, 1$ ハイゼンベルグ 模型ではそのようなカイラル相は実現しないこと、に要約される。

カイラル秩序の可能性を探索するため、まず、全カイラリティの二乗 $\langle \kappa^2 \rangle$ およびそれに対応する Binder パラメータ g_κ を数値的厳密対角化によって調べる。カイラル秩序パラメータ

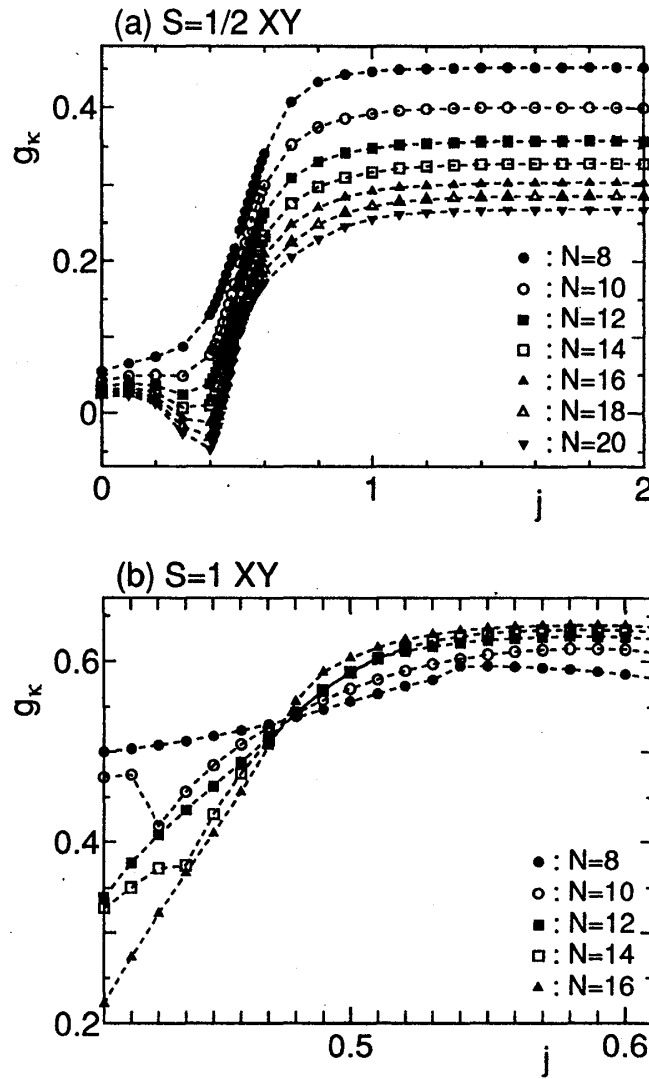


図 1: カイラリティの Binder パラメータ g_κ vs j : (a) $S=1/2$ XY 鎖; (b) $S=1$ XY 鎖。

(Eq.(2) 参照) は、ここでは量子スピンの対応するもので、Binder パラメータ g_κ は

$$g_\kappa = \left(1 - \frac{\langle \kappa^4 \rangle}{3 \langle \kappa^2 \rangle^2}\right), \quad (3)$$

で定義される。計算は、有限の開放端鎖に対して、 $S=1/2$ では $N=20$ まで、 $S=1$ では $N=16$ まで行った [15]。得られた基底状態はすべて、 $S_{\text{total}}^z = 0$ の部分空間に属し、パリティは偶である。

図 1 は、XY 模型で、種々の N に対して計算したカイラリティの Binder パラメータ g_κ を j の関数として描いたものである。図 1(a) から分かるように、 $S=1/2$ 鎖の g_κ は、どの j に対しても N の増加と共に単調に減少しており、カイラル秩序がないことを示唆している。ところが、 $S=1$ 鎖の g_κ の振る舞いは大きく異なっており、図 1(b) に見られるように、種々の N に対する g_κ は、ほぼ同一の j 、 $j = 0.475 \pm 0.005$ 、で交わり、それより大きい j では、 g_κ は N の増加と共に増加している。これは、大きな j の所でカイラリティが長距離秩序となっていることを

示している。

一方、ハイゼンベルグ模型では、 $S = 1/2$ および 1 いずれの場合も、計算した g_K は N の増加と共に減少しており、明らかにカイラル秩序は消滅している。

数値的厳密対角化で存在が示されたカイラル相の性質と、カイラル相への相転移をより詳しく調べるために、 $S=1$ XY 開放端鎖について、次式で定義される、カイラル相関関数 $C_K(r)$ 、スピン相関関数 $C_s(r)$ 、ストリング相関 $C_{str}(r)$ を密度行列繰り込み群の方法 [16] で計算してみる。

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

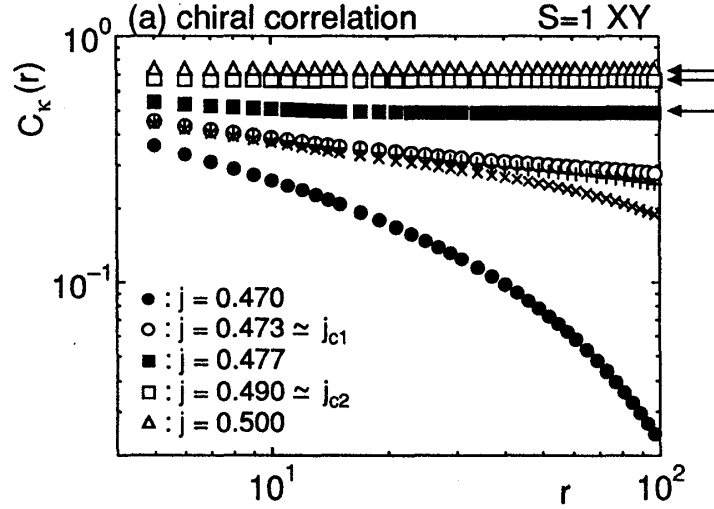
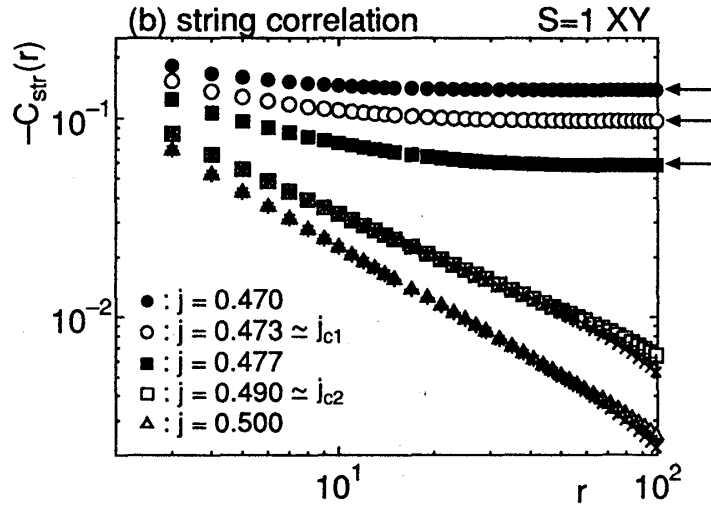
$$C_s(r) = \langle S_{r_0-r/2}^x S_{r_0+r/2}^x \rangle, \quad (5)$$

$$C_{str}(r) = \langle S_{r_0-r/2}^z (\exp i\pi \sum_{j=r_0-r/2+1}^{r_0+r/2-1} S_j^z) S_{r_0+r/2}^z \rangle, \quad (6)$$

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 $r_0=N/2$ 、奇数 r に対しては $r_0=(N+1)/2$ である。この計算では、パリティ偶、 $S_{total}^z=0$ の部分空間内で、 M ブロック状態（但し、 $M \leq 300$ ）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、ハルデン相では、それぞれ、カイラル相関関数 $C_K(r)$ 、ストリング相関関数 $C_{str}(r)$ が、十分大きい r に対して一定になるはずである。

図 2(a)-(c) は、いくつかの j について計算したカイラル、スピン、およびストリング相関関数の r -依存性を log-log プロットしたものである。大きい r での $C_K(r)$ の振る舞い（図 2(a)）は、 $j > j_{c1} \simeq 0.473$ 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。 $j_{c1} = 0.473 \pm 0.001$ という値は、Binder パラメータの解析から得られた値とほぼ一致している。一方、大きい r での $C_{str}(r)$ の振る舞い（図 2(b)）は、 $j < j_{c2} \simeq 0.490$ で系はハルデン相にあり、 $j > j_{c2}$ ではカイラル相関関数が暴減衰する相にあることを示している。小さい j でのハルデン相の存在は、Ref.[8] の結果と同様である。

ここで、興味深い点は、我々が得た j_{c2} の値 $j_{c2} = 0.490_{-0.005}^{+0.010}$ が、 j_{c1} の値 $j_{c1} = 0.473 \pm 0.001$ より明らかに大きいことである。これは、カイラル相に 2 つの異なった型があることを示している。1 つはストリング秩序を保ったもの ($j_{c1} < j < j_{c2}$) で、他はストリング秩序をもたないもの ($j > j_{c2}$) である。このことは、図 2(c) に示したスピン相関関数 $C_s(r)$ の振る舞いからも支持される。（図 2(c) では、 $C_s(r)$ そのものではなく、振動因子 $\cos(Qr)$ で割ったものを図示している。）実際、ヘリカルスピン相関の減衰は、 $j > j_{c2}$ での $C_s(r)/\cos(Qr)$ の直線性から暴的（ギャップレス状態）であることを、 $j < j_{c2}$ での下への曲がりから指数関数的（ギャップド状態）であることを指示している。ここで、 j がリフシツ点 j_L を越えると系はある波数 $Q < \pi$ で特徴づけられるヘリカル型短距離秩序を示すことを追記しておく。 $S = 1$ XY 模型でのリフシツ点は $j_L = 0.313 \pm 0.001$ と見積もられる。また、一般の $S < \infty$ の場合、任意の j に対して磁氣的（スピン）長距離秩序が存在しないことは、厳密に証明されている [17]。この狭い j_{c1} と j_{c2} 間にある中間相、即ち、ギャップドカイラル相、の存在は、図 2 に示した $j = 0.477$ における相関関数の振る舞いからもはっきりと見てとれる。

図2 (a) カイラル相関関数 $C_\kappa(r)$ vs r の log-log プロット。図2 (b) スtring相関関数 $-C_{\text{str}}(r)$ vs r の log-log プロット。図2 (c) スピン相関関数 $C_\kappa(r)/\cos(Qr)$ vs r の log-log プロット (次ページ)。

かくして、 $S=1$ XY スピン鎖は、 j の増加と共に2つの逐次的相転移を行う。即ち、最初に、 $j = j_{c1}$ 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。ギャップドカイラル相では、カイラルおよびString長距離秩序が共存し、スピン相関は指数的減衰をする。一方、ギャップレスカイラル相では、カイラリティのみが長距離秩序となり、スピンおよびString相関は冪的減衰をする。カイラル相では、基底状態にはカイラリティの右または左廻りに対応した2重縮退があり、その上のギャップの有無によってギャップドかギャップレスかが区別される。

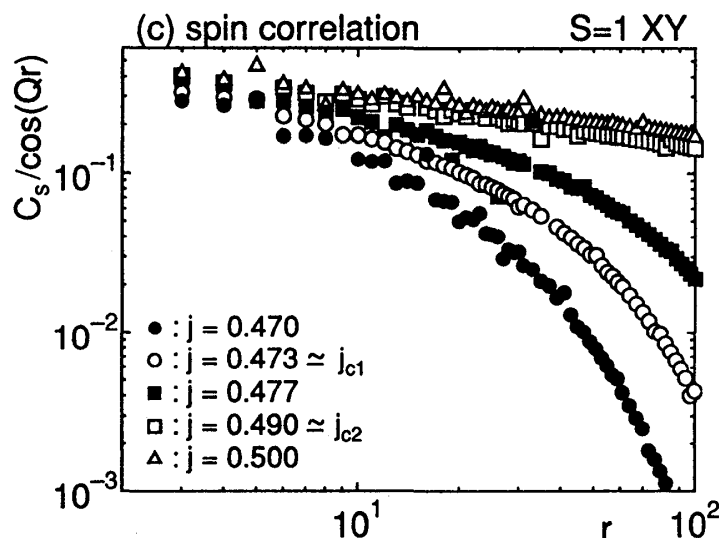


図 2: 種々の j に対する相関関数 vs r の log-log プロット。(a) カイラル相関 $C_\kappa(r)$ 、(b) ストリング相関 $-C_{\text{str}}(r)$ 、(c) スピン相関 $C_\kappa(r)/\cos(Qr)$ 。矢印は $r = \infty$ への外挿値。ブロック状態数 M は $M = 300$ である。 M 依存性が大きい場合、十字印して $M = 220$ と 260 のデータを示してある。

対称性から見ると、ギャップドカイラル相は、並進および時間反転対称性の保存と、パリティ対称性の自発的破れで特徴付けられる。従って、その破れた対称性から考えて、 $j = j_{c1}$ における相転移は Ising 型と期待される。実際、 $C_\kappa(r)$ からカイラル相関長 ξ_κ を求めて、それを、標準的な冪形式 $\xi_\kappa \sim (j_{c1} - j)^{-\nu_\kappa}$ にフィットさせて得た ν_κ の値は $\nu_\kappa \simeq 0.9 \pm 0.1$ となり、2次元 Ising の値 $\nu_\kappa = 1$ より幾分小さいが、Ising 型を示唆している。現在、 $j = j_{c2}$ における KT-型相転移を含めて、各相の臨界的性質を詳細に調べている。

最近、Nersisyan 達は、 $S=1/2$ XY 模型で j が大きい場合のパリティの破れについて議論している [18]。彼らの予想に反して、 $S=1/2$ XY およびハイゼンベルグ模型での我々の計算では、ハルデン [4] や利根川達 [1] によって報告されてきたスピン流体相およびハルデン相以外、新しいカイラル相の存在に対して否定的である [19]。我々が取り扱った模型の範囲では、カイラル相は $S=1$ XY 模型に特有のものに見える。ハイゼンベルグ模型ではスピンの面内に拘束されにくいこと、 $S=1/2$ では量子揺らぎが大きいこと、からこのような傾向は、定性的には理解できる。

この $S=1$ XY 鎖における新しいカイラル相転移の振る舞いがフラストレートした古典的 2 次元 XY 模型（例えば、三角格子 XY 反強磁性体 [12]、磁場中のジョセフソン結合格子 [13] など）の熱的相転移と類似している点は興味深い。これらの古典的系では、宮下・ス波や最近では Olsson のモンテカルロシミュレーションによって、熱的相転移が 2 つのカイラル相へ 2 段階で起こることが示されている。この 2 つの相は、それぞれ、スピン相関の指数減衰と冪的減衰で特徴付けられる。現在のところ、この類似の物理的背景は不明である。

最後に、この新しいカイラル相と実験との関連について述べたい。カイラル相を見いだすため

には、先ず、 j が適当な値の $S = 1$ XY ジグザグスピン鎖を準備する必要がある。弱い 3 次元の相互作用の元では、 j が大きいところで安定化するギャップレスカイラル相はヘリカル長距離秩序を示すと期待されるが、一方、ギャップドカイラル相はギャップをもったままであろう。それ故、適当な物質で実験的にギャップドカイラル相を見いだすのは興味深い実験テーマである。問題は、ギャップドカイラル相が j の非常に狭い範囲でしか実現しないことである。従って、ギャップドカイラル相を見いだすには、圧力をかけるなどして、 j を微調整する必要がある。適当なサンプルが準備できれば、偏極中性子などを用いることによって、原理的には、カイラルを測定できるであろう [11, 20]。

本研究の結果を要約すると以下ようになる。フラストレートした $S=1/2$ および 1 量子スピン鎖の基底状態の数値的解析により、 $S=1$ XY 模型では、広範囲の j においてギャップレスおよびギャップドカイラル相が実現されていること、しかし、 $S=1/2$ XY 模型、 $S=1/2$ および 1 ハイゼンベルグ模型ではカイラル相が存在しないこと、を見いだした。2つのカイラル相では、カイラリティが長距離秩序となっており、スピン相関は冪的または指数的の減衰している。現在、これらの系の臨界的性質、 j - λ 平面での相図などの研究を進めており、より詳細な報告を近々発表する予定である。

謝辞

この研究を進めるにあたって有益な助言を頂いた神戸大学の利根川孝教授に謝意を表したい。また、数値計算の一部は京都大学基礎物理学研究所の計算機を使って行った。

参考文献

- [1] 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.
- [2] K. Okamoto and K. Nomura, Phys. Lett. A **169**, (1992) 433; K. Nomura and K. Okamoto, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, (1993) 1123.
- [3] C.K. Majumder and D.K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, (1969) 1399.
- [4] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. B **25**, (1982) 4925.
- [5] T. Tonegawa, M. Kaburagi, N. Ichikawa and I. Harada, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, (1992) 2890.
- [6] A. Kolezhuk, R. Roth and U. Schollwöck, Phys. Rev. Lett. **77**, (1996) 5142; Phys. Rev. B **55**, (1997) 8928.
- [7] H. Shimaoka and K. Kuboki, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, (1993) 3257.
- [8] T. Tonegawa, S. Suzuki and M. Kaburagi, J. Magn. Magn. Mater. **140-144**, (1995) 1613.

- [9] H. Kawamura, Phys. Rev. B **38**, (1988) 4916.
- [10] H. Frahm and C. Rödenbeck, J. Phys. A **30**, (1997) 4467.
- [11] H. Kawamura, J. Phys. Condens. Matter **10**, (1998) 4707.
- [12] S. Miyashita and H. Shiba, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, (1984) 1145; D.H. Lee, J.D. Jonnopoulos, J.W. Negele and D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. **52**, (1984) 433; L. Capriotti, R. Vaia, A. Cuccoli and V. Tognetti, Phys. Rev. B **58**, (1998) 273.
- [13] S. Teitel and C. Jayaprakash Phys. Rev. B **27**, (1983) 598; G. Ramirez-Santiago and J.V. José, Phys. Rev. Lett. **68**, (1992) 1224; P. Olsson, Phys. Rev. Lett. **75**, (1995) 2758; Phys. Rev. B **55**, (1997) 3585.
- [14] H. Kawamura and M. Tanemura, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, (1991) 1092; H. Kawamura, Phys. Rev. B **51**, (1995) 12398.
- [15] より正確には、開放端のスピン鎖に対する g_κ は $\kappa = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \kappa_i$ を計算している.
- [16] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, (1992) 2863; Phys. Rev. B **48**, (1993) 10345.
- [17] T. Momoi, J. Stat. Phys. **85**, (1996) 193.
- [18] A.A. Nersesyan, A.O. Gogolin and F.H.L. Eßler, Phys. Rev. Lett. **81**, (1998) 910.
- [19] 例えば、数値的厳密対角化で g_κ を $j = 1000$ まで計算し、図 1(a) とほぼ同じ振る舞いを得ている.
- [20] M.L. Plumer, H. Kawamura and A. Caillé, Phys. Rev. B **43**, (1991) 13786; S.V. Maleyev, Phys. Rev. Lett **75**, (1995) 4682.