

## 歪んだダイヤモンド型 $XXZ$ スピン鎖の基底状態

東京工業大学 大学院理工学研究科 岡本 清美<sup>1</sup>, 市川 豊

図のような  $S = 1/2$  の歪んだダイヤモンド型スピン鎖で、相互作用に  $XXZ$  異方性がある場合の基底状態を解析的および数値的に調べた。ハミルトニアンは

$$H = J_1 \sum_j \{h_{3j-1,3j}(\Delta) + h_{3j,3j+1}(\Delta)\} + J_2 \sum_j h_{3j+1,3j+2}(\Delta) + J_3 \sum_j \{h_{3j-2,3j}(\Delta) + h_{3j,3j+2}(\Delta)\} \quad (1)$$

$$h_{l,m}(\Delta) = S_l^x S_m^x + S_l^y S_m^y + \Delta S_l^z S_m^z \quad (2)$$

で表され、 $\Delta$  が  $XXZ$  異方性のパラメーターである。3種類の相互作用はいずれも反強磁性的 ( $J_1, J_2, J_3 > 0$ ) とし、また、 $J_1 \geq J_3$  として一般性を失わない ( $J_1$  と  $J_3$  は入れ換え可能である)。

この歪んだダイヤモンド型スピン鎖の等方的な場合 ( $\Delta = 1$ ) はもともと三量体スピン鎖  $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$  のモデルとして提案されたものである [1]。Okamoto 達 [2] は  $\Delta = 1$  の場合について零磁場基底状態相図を調べ、飽和磁化  $M_s$  の  $1/3$  のフェリ相、ダイヤモンド相、スピン液体 (SF) 相、の3種の相が

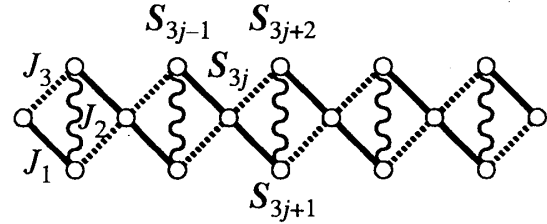


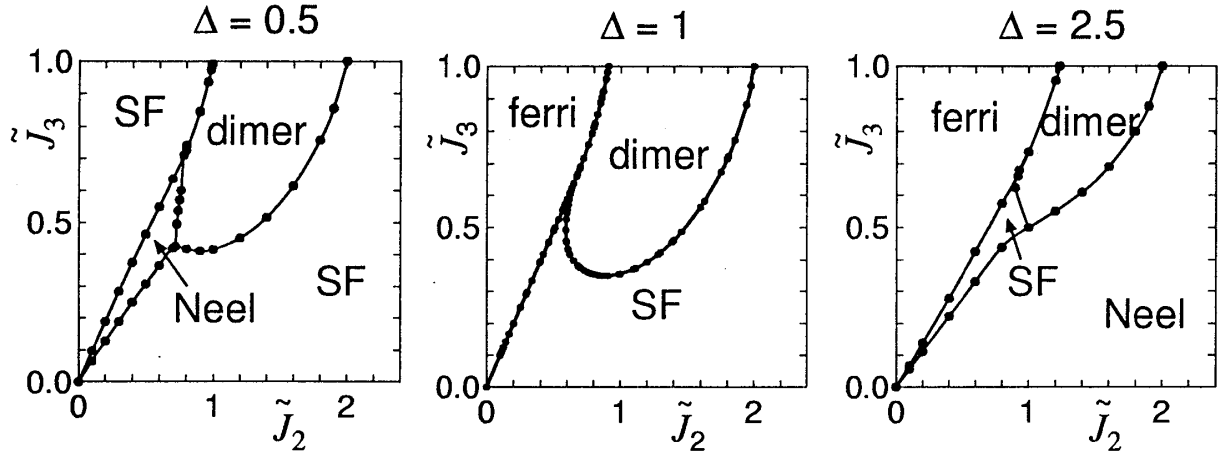
図 1: 歪んだダイヤモンド型スピン鎖

存在することを示し、相図を決定した (図 2 の  $\Delta = 1$  参照)。その後、磁化曲線や、 $(1/3)M_s$  プラトー相図、 $(2/3)M_s$  プラトー相図、帯磁率の温度変化、などについても調べられている [3, 4, 5, 12]。

この系は、三量体性 [6, 7, 8, 9] とフラストレーション [10, 11] の両者を併せ持っていて、特徴的な相図や2箇所プラトーは、両者のからみで生じたものである。本研究では、相互作用の異方性を導入することにより、三量体性、フラストレーション、異方性の三者の微妙なバランスによって、さらに興味深い零磁場基底状態相図が得られることを示した。図 2 は我々が最終的に数値計算 (厳密対角化データをレベルスペクトロスコピーで解析したもの) で決定した相図で、相互作用が  $XY$  的 ( $\Delta = 0.5$  である場合、等方的な場合 ( $\Delta = 1$ ), Ising 的 ( $\Delta = 2.5$ ), の三者を示した。図で、 $\tilde{J}_2 \equiv J_2/J_1$ ,  $\tilde{J}_3 \equiv J_3/J_1$  である。 $\Delta = 1$  の等方的な場合はすでに Okamoto 達 [2] によって得られている。

最も注目すべきところは、 $\Delta \neq 1$  の場合に存在する中央の細い領域で、相互作用が  $XY$  的であるのに Néel 相が現れ、また、相互作用が Ising 的であるのにスピン液体 (SF) 相が現れている。す

<sup>1</sup>E-mail:kokamoto@stat.phys.titech.ac.jp

図 2: 歪んだダイヤモンド型  $XXZ$  スピン鎖の無磁場基底状態相図

なわち、相互作用の異方性と、それから自然に予想される基底状態との関係が逆転している。このような「逆転相」の存在は、我々の知る限り、本研究で初めて指摘されたものである。逆転相の存在に関しては  $\Delta = 1$  は特異点になっていて、 $\Delta \rightarrow 1 \pm 0$  の極限でも逆転相は有限の範囲で残る。後に示すように、 $\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$  では  $\Delta \rightarrow 1 \pm 0$  の極限で  $0.625\tilde{J}_2 < \tilde{J}_3 < \tilde{J}_2$  が逆転相になっている。

以下、我々がどのようにして相図を得たかについて述べる。まず、三量体性が強い極限  $\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$  での縮退摂動論を展開しよう。 $\tilde{J}_2 = \tilde{J}_3 = 0$  では 3 スピン問題で (図 1 の実線で結ばれた 3 スピン).  $2^3 = 8$  通りの状態があるが、それらのうちでエネルギーの低い重要な状態は  $S_{\text{tot}}^z = \pm 1/2$  の最低状態

$$\psi_1 = (1/A)(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - a|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle), \quad \psi_2 = (1/A)(|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - a|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) \quad (3)$$

である。ここで、 $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$  等は順に  $3j-1, 3j, 3j+1$  番目のスピン状態であり、

$$a = (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 8})/4, \quad A = \sqrt{a^2 + 2} \quad (4)$$

である。状態空間をこれら 2 状態に限定して大きさ  $1/2$  の擬スピン  $T$  の  $|\uparrow\rangle$  と  $|\downarrow\rangle$  で表現し、 $J_2, J_3$  の最低次で実効ハミルトニアンを求めると

$$H_{\text{eff}} = \sum_j \left\{ \frac{J_{\text{eff}}^{xy}}{2} (T_j^x T_{j+1}^x + T_j^y T_{j+1}^y) + J_{\text{eff}}^z T_j^z T_{j+1}^z \right\} \quad (5)$$

が得られる。ただし

$$J_{\text{eff}}^{xy} = \frac{a}{(a^2 + 2)^2} (4aJ_2 - 8J_3), \quad J_{\text{eff}}^z = \frac{a(a^2 - 2)}{(a^2 + 2)^2} \{a^2 J_2 - 2(a^2 - 2)J_3\} \quad (6).$$

である。

$\Delta = 1$  の等方的な場合は  $a = 2$  で、 $J_{\text{eff}}^{xy} = J_{\text{eff}}^z = (4/9)(J_2 - J_3)$  になる。したがって、基底状態は、 $J_2 > J_3$  では  $T$  の擬スピン描像で SF 状態 (もとの  $S$  でも SF 状態),  $J_2 \leq J_3$  では  $T$  の擬ス

ピン描像でフェロ状態 (もとの  $S$  で  $M_s/3$  フェリ状態) である。これは図2の  $\Delta = 1$  の場合のフェリ-SF境界が原点付近で傾き1であることを説明している。

$\Delta \neq 1$  の場合に移ろう。基底状態は次のようになっている。

|        |                                                  |                                                      |                                              |
|--------|--------------------------------------------------|------------------------------------------------------|----------------------------------------------|
|        | $J_{\text{eff}}^z/ J_{\text{eff}}^{xy}  \leq -1$ | $-1 < J_{\text{eff}}^z/ J_{\text{eff}}^{xy}  \leq 1$ | $1 < J_{\text{eff}}^z/ J_{\text{eff}}^{xy} $ |
| $T$ 描像 | フェロ                                              | SF                                                   | Néel                                         |
| $S$ 描像 | $(M_s/3)$ フェリ                                    | SF                                                   | Néel                                         |

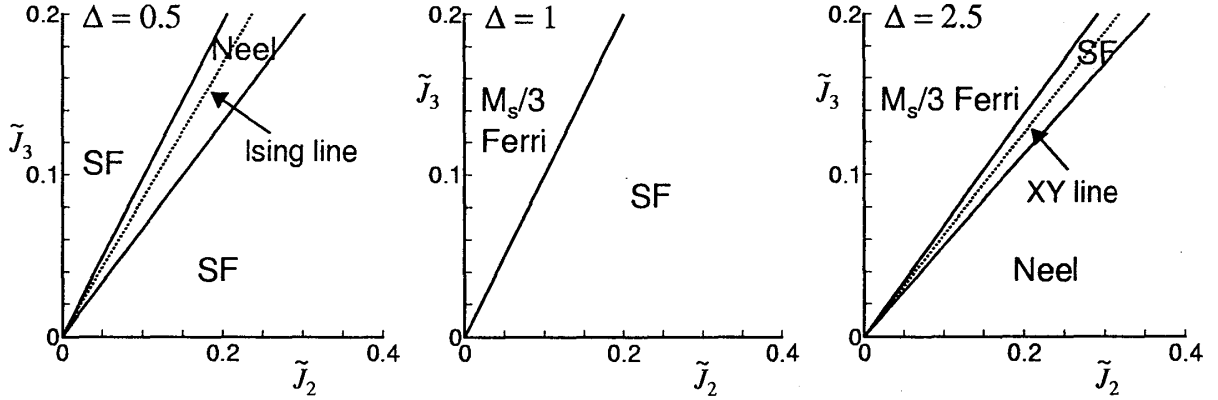


図 3: 縮退摂動論による相図

$\Delta = 0.5, 1, 2.5$  の場合の相図を図3に示した。Ising line 上では  $J_{\text{eff}}^{xy} = 0$ 、XY line 上では  $J_{\text{eff}}^z = 0$  である。 $\Delta \neq 1$  の場合の右側の相境界線は  $\Delta \rightarrow 1$  で傾きが 0.625 になるが、 $\Delta = 1$  ではこの相境界線が消滅し、SF 相と Néel 相の区別がなくなり共に SF 相になる。この意味で、 $\Delta = 1$  は特異点になっている。式の上では、因子  $a - 2$  (この因子は  $\Delta = 1$  の場合にゼロ) の作用による。左側の相境界線については特異な事情はない。

上の縮退摂動論は  $\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$  に限られているし、ダイマー状態を記述することはできない。したがって、相境界線を具体的に決めるには数値計算に依らざるを得ない。我々は、有限系の厳密対角化データをレベルスペクトロスコピーで解析することにより、相境界線を決定した [2]。スピン数  $N$ 、 $S_{\text{tot}}^z$  の固有値が  $M$  の部分空間における最低エネルギーを  $E_0(N, M)$  と書くとき、今の場合に重要な励起は、

$$\Delta E_{\text{SF}}(N) \equiv E_0(N, \pm 1) - E_0(N, 0) \quad (7)$$

$$\Delta E_{\text{Neel}}(N) \equiv E_{\text{Neel}}(N, 0) - E_0(N, 0) \quad (8)$$

$$\Delta E_{\text{dimer}}(N) \equiv E_{\text{dimer}}(N, 0) - E_0(N, 0) \quad (9)$$

の3つである。ここで、 $\Delta E_{\text{Neel}}(N)$  と  $\Delta E_{\text{dimer}}(N)$  は共に  $M = 0$  部分空間での低い励起状態で、空間反転に対する対称性で区別できる。また、 $\Delta E_{\text{Neel}}(N)$  は  $\Delta = 1$  で  $E_0(N, \pm 1)$  と縮退する (つまり、 $S_{\text{tot}} = 1$  の  $S_{\text{tot}}^z = 0, \pm 1$  の3状態になっている)。上の3つの励起を比べて、最低励起に対応する状態が基底状態になっている。このようにして求めた相境界が図2に示したものである。 $\tilde{J}_2, \tilde{J}_3 \ll 1$  での相境界は直線で、その傾きは縮退摂動論の結果と一致している。

## 謝辞

利根川孝, 鐙木誠, 両氏には有用な議論をしていただいた. また, 数値計算の一部は西森秀稔氏の TITPACK Ver.2 を使用している.

## 参考文献

- [1] M. Ishii, H. Tanaka, M. Mori, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Tatani, Y. Narumi and K. Kindo: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 340.
- [2] K. Okamoto, T. Tonegawa, Y. Takahashi and M. Kaburagi: J. Phys.:Condensed Matter, **11** (1999) 10485.
- [3] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi and M. Kaburagi: to be published in Supple. J. Phys. Soc. Jpn. (2000);
- [4] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi and M. Kaburagi: RIKEN Review No.27 (April, 2000) 60.
- [5] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi and M. Kaburagi: to be published in J. Phys. Chem. Solids
- [6] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 2359
- [7] K. Okamoto: Solid State Commun. **98** (1996) 245.
- [8] K. Okamoto and A. Kitazawa: J. Phys. A: Math. Gen. **32** (1999) 4601.
- [9] A. Kitazawa and K. Okamoto: J. Phys.: Cond. Matter **11** (1999) 9765-9774.
- [10] K. Okamoto and K. Nomura: Phys. Lett. A **169** (1992) 433.
- [11] K. Nomura and K. Okamoto: J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 1123.
- [12] A. Honecker and A. Läuchli: cond-mat/0005398