

フラストレーションの強い領域でのジグザグスピン鎖

新潟大学理、 福井工大 奥西巧一¹， 利根川 孝²

フラストレーションの強い領域のジグザグ鎖の磁化過程を密度行列繰り込み群法で詳細に調べ、その磁気的相図の概要を決定した。ジグザグ鎖のモデル自体はシンプルな形をしているにもかかわらず、1/3 プラトー、新タイプのカスプ、全磁化が奇数の場合に現れる系の反転対称性の破れなど、興味深い現象が現れることが分かった。

最近、強いフラストレーションを持つ1次元量子系の磁化過程が注目を集めている。これは、磁化過程にプラトーやカスプ、ジャンプなど、フラストレーションにより誘発されたさまざまな特徴的な振舞いが現れることが理論的に分かっただけでなく、実際に実験でもフラストレーションに起因する現象が観測されつつあるためであろう。さて、フラストレーションを持つ $S = 1/2$ スピン鎖のうちでも代表的なものの一つが、ジグザグスピン鎖：

$$\mathcal{H} = \sum J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + J_2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}$$

である。もちろん、代表的なモデルであるからにはその性質についてはよく調べられてきており [1, 2, 3]、ゼロ磁場の基底状態の振舞いに関しては、 $J_2/J_1 < 0.2411$ ではギャップレススピン液体、 $J_2/J_1 > 0.2411$ ではギャップのあるダイマー状態であるということが分かっている [2]。また、磁化過程に関しても、最近、 $J_2/J_1 < 0.6$ の領域までを密度行列繰り込み群などの数値的な手法により調べ、磁化カスプの出現やその背後にあるスピノン (もしくはマグノン) の分散関係の形の変化などの興味深い現象を報告した [5]。しかし、フラストレーションの強い領域、とくに $J_2/J_1 > 0.6$ の領域の磁化過程の詳細な解析に関しては、実際問題、これまでほとんど手付かずであったと言ってよい。この領域になると、弱結合の理論が正当化される領域からはかなり遠いし、また、数値的な手法もあまり有効に働かなかったからであろう。

ここでは、 $J_2/J_1 > 0.6$ のフラストレーションの強い領域のジグザグ鎖の磁化過程を密度行列繰り込み群 (DMRG) 法で詳細に調べた結果を報告する (数値的手法に関して進展があったと言うよりも根性が進展した)。具体的には、1/3 プラトー、これまでのカスプとは異なるタイプであると考えられるカスプ、全磁化が奇数の場合に現れる系の反転対称性の破れなど、興味深い現象を多数見いだした。モデル自体が並進対称であるため、1/3 プラトーに関してはその並進対称性が自発的に破れた状態になっている。また、カスプに関しては、 J_2/J_1 を大きくしていくにしたがって、いったんカスプが 1/3 プラトーに吸収された後に再び現れることが分かった。このように、ジグザグ鎖のモデル自体はシンプルな形をしているが、相図全体はかなり複雑な構造になっていることが分かった。以下では、個々の計算結果とその物理的な背景について述べる。

¹ E-mail: okunishi@phys.sc.niigata-u.ac.jp

² E-mail: tonegawa@ccmails.fukui-ut.ac.jp

ジグザグスピン鎖の持つ重要な性質の一つは、系が並進対称なことである。 $J_2 = 0$, $J_1 = 0$ がそれぞれ、1本のハイゼンベルク鎖、2本の独立なハイゼンベルク鎖に対応しており、フラストレーションの度合いを変えるということはその1本鎖と2本鎖の間を系の並進対称性を保ったまま移り変わって行くということに対応する。そして、この移り変わりの過程の中でさまざまなエキゾチックな現象が引き起こされるのである。さらに重要なのが、たとえフラストレーションの度合いを止めておいたとしても、磁場を変化させて行くと、1本鎖的な描像が良い場合、2本鎖的な描像、もしくは、それ以外の描像が良い場合など、いろいろな場面を移り変わって行くということである。考えている磁場領域によって系の特徴の出方が異なってくるということが、ジグザグスピン鎖の磁化過程を非常に多彩でおもしろくしているのである。

具体的に磁化曲線の計算結果をみていくことにする。磁化曲線はDMRGを用いて計算した。DMRGには無限系を扱うものと有限の長さの系を扱うものの2種類あるが、両方を用いて計算した。しかし、ここでは主に有限系の開いた境界条件に対する結果を示す。図は、 $J_2/J_1 = 0.6, 0.7$

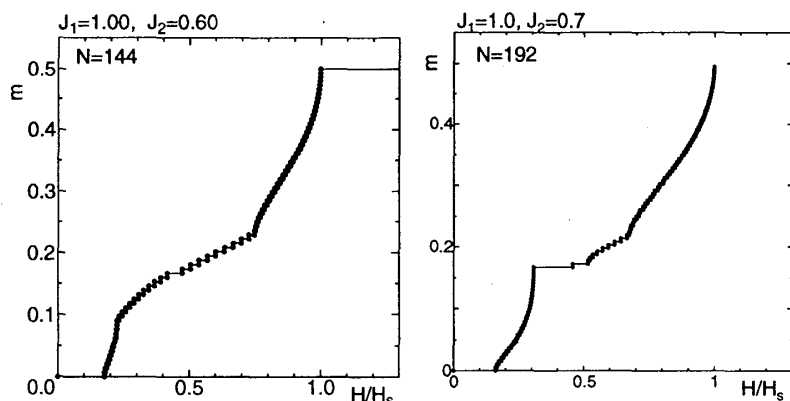


図 1: $J_2/J_1 = 0.6, 0.7$ の磁化曲線。磁場は飽和磁場で規格化してある

の磁化曲線である。 $J_2/J_1 = 0.6$ の場合は、磁化曲線の上側と下側にそれぞれカスプがあることがわかるが、これらは以前報告されていたものであり、そのメカニズムはフラストレーション効果によりスピノン (低磁場側) もしくは飽和磁化からのスピン波 (高磁場側) の分散関係の形の変化により説明される。新しい点は、飽和磁化の $1/3$ のところに小さなプラトーが現れている点である。 J_2/J_1 を大きくしていくと、このプラトーの幅も大きくなると同時に、上下のカスプはどんどん $1/3$ プラトーに近づいて行く。そして、 $J_2/J_1 = 0.7$ のところで、とうとう下側カスプがプラトーに吸収されてしまい、磁化曲線の下側のブランチがプラトーに (恐らく) 傾き無限大で突き刺さる。

さらに、 J_2/J_1 を大きくすると、今度はいったん消滅したはずの下側カスプが再び現れてくるとともに、逆に上側のカスプが $1/3$ プラトーに吸収される。 $J_2/J_1 = 0.8$ の図にその様子が表れているが、ここで問題になるのが、下側カスプとプラトーの間に奇妙な遇奇性が現れてしまうことである (正しい有限系の磁化曲線は奇数磁化を飛ばしたのものになるが、ここではわざと奇数磁化の階段も描いてある)。さらに、 $J_2/J_1 = 1.0$ になり、上側カスプがプラトーに吸収されたあとは、その遇奇性がプラトーの上側にまで達するようになる。また、このあたりになるとプラトーの幅

がかなり狭くなってきており、最終的に $J_1/J_2 = 0.8$ 近傍でこの $1/3$ プラトーは消滅してしまう [6]. また、下側のカスプに関しては、 $J_1/J_2(J_1/J_2)$ をさらに小さく (大きく) していくと、どんどん 0 磁場側に下がっていく。しかしこのカスプは消えてしまうわけではなく、 $J_1/J_2 = 0.5$ 程度までは残っていることが確認できる。それ以上は数値的に確認することは難しいが、素直に外挿すると $J_1/J_2 = 0$ まで残っていきそうである [7].

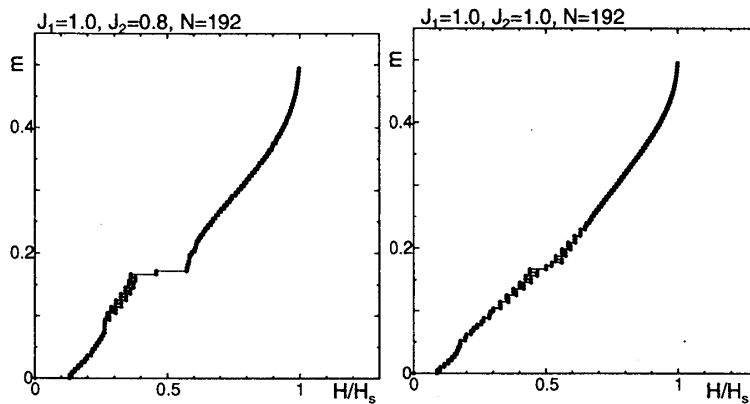


図 2: $J_2/J_1 = 0.8, 1.0$ の磁化曲線。磁化曲線に遇奇性が現れる。

さて、ここで、 $1/3$ プラトーと磁化曲線の遇奇性について詳しく分析する。まずプラトーであるが、ハミルトニアンが並進対称なためプラトー状態はその周期が 3 で自発的に破れてなければいけない。これを示すために、プラトー状態での磁化分布を計算したのが図 3 である。ギャップのあることを反映して端の影響はすぐに消えてしまい、そのまま周期 3 の up-up-down 構造に突入することが分かる。実は、この up-up-down 構造はイジング異方性の極限で知られているものに断熱的に繋がっており [8, 4]、それがなぜか量子揺らぎの強い等方的な場合まで生き残ってくる。その $1/3$ プラトーのメカニズムとしては、2次元の三角格子 XXZ スピン系のように格子の三角形構造が重要であることが予想される。[9] しかしながら、今の場合は、やはり 1次元量子揺らぎの影響が大きいことは確かで単純な三角形由来の性質からはかなり遠いようである。実際、単純に up-up-down 状態からのスピン波を構成してもうまく行かなかった。プラトー生成のメカニズムは今後の課題である。

次に遇奇性についてであるが、そもそも、 $J_1 \simeq J_2$ の領域では 1 本鎖の性質と 2 本鎖の性質が混在し、系が強い非整合性を持っている。そのため、数値計算自体がかなり難しいのであるが、中でも奇数磁化では収束性も悪く、やっと計算できてもパリティが破れた状態が実現してしまうため、当初 DMRG の計算が破綻しているとの予測もあった。しかし、それはむしろ系の本質的な性質を反映した結果であると分かった。具体的には、遇奇性が出る領域では 2 本鎖的な性質が強くでているため [10]、磁化過程は 2 本の鎖に磁化をわけて詰めていくという描像で表されることが考えられる。奇数磁化の場合は、奇数個の磁化を偶数本の鎖に平等に分配できないため余った磁化 1 つ分不安定になり、偶数磁化のときよりエネルギーが上がってしまう。そしてその余った磁化が 2 本の鎖のうちどちらかに片寄ってしまうため、パリティが破れてしまうのである。実

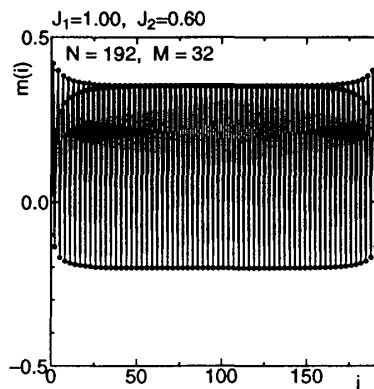


図 3: $J_2/J_1 = 0.6$, $1/3$ プラトー状態での磁化分布

際パリティの破れた状態での磁化分布を調べると、偶数サイトと奇数サイトでの磁化の合計に差が現れることがわかる。もちろん、系が短ければ磁化が左右に片寄った状態の重ねあわせが基底状態になるが、ある程度鎖が長くなれば数値計算上どちらか一方が選ばれてパリティの破れた状態が実現される。しかしながら、この性質が熱力学極限においていったいどういう風になるのかは未開拓な問題である。

そもそも、 $J_1 \simeq J_2$ の領域では強い非整合性のため、完全に開いた境界条件で 192 サイトまで計算してもサイズ依存性が振動的になり、サイズ無限大の外挿が単純ではない。しかし、磁化過程の構造自体にはサイズを変えてもそれほど大きな変化は現れず、無限系の計算結果とも良く一致しているため、磁気相図の概形は現状ではほぼ確定していると考えている。最後に、得られた相図をまとめとして示す。相図の全体像が得られたとはいえ、個々の現象の解明はまだまだこれからである。ジグザグスピン鎖自体はシンプルな形をしているが、そこに含まれている物理的な内容はまだまだ尽きないようである。

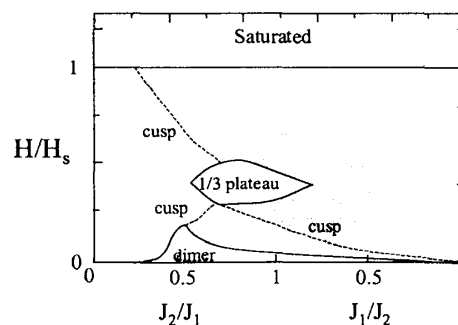


図 4: ジグザグスピン鎖の磁気相図。灰色部分は非整合な相関の強いところ。

参考文献

- [1] C.K. Majumdar and D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1399 (1969). F.D.M. Haldane, Phys. Rev. B **25**, 4925 (1982). T. Tonegawa and I. Harada, J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 2153 (1987). S. R. White and I. Affleck, Phys. Rev. B **54**, 9862 (1996).
- [2] K. Okamoto and K. Nomura, Phys. Lett. A **169**, 433 (1992).
- [3] B.S. Shastri and B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**, 964 (1981). H. Yokoyama and Y. Saiga, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 3617 (1997). S. Brehmer, *et al.* J. Phys.:condens. matter **10**, 1103 (1998).
- [4] T. Tonegawa and I. Harada, Physica B **155**, 379 (1989).
- [5] K. Okunishi, Y. Hieida and Y. Akutsu, Phys. Rev. B **60**, R6953 (1999). N. Maeshima and K. Okunishi, Phys. Rev. B **62**, 934 (2000). K. Okunishi and N. Maeshima, Phys. Rev. B **64**, 212406 (2001).
- [6] 有限系の計算では遇奇性と混じってプラトー消滅を見にくいですが、無限系の計算を行うと、およそ $J_1/J_2 = 0.8$ となる。
- [7] もしそうなら、2本ハイゼンベルク鎖からの弱結合理論も再検討が必要かもしれない。
- [8] T. Morita and T. Horiguchi, Phys. Lett. **38A**, 223 (1972).
- [9] S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 3605 (1986). この他、三角格子に関しては文献は多数ある。量子系の磁化過程に関しては例えば、A. Honecker *et al* Eur. Phys. J. B **15**, 423 (2000) 中の文献を参照。
- [10] 実際、遇奇性のある領域は、 $J_1/J_2 = 0$ の2本鎖に連続的に繋がって行く。