

$S = 1/2$ Trimerized XXZ 鎖の磁化プラトー

東京工業大学 大学院理工学研究科 岡本 清美¹
九州大学 理学部 北澤 充弘²

最近、量子スピン鎖における磁化曲線の量子化プラトーが盛んに研究されている [1-12]. 量子化プラトーが現れる必要条件是 Oshikawa-Yamanaka-Affleck [6] によって得られていて、状態の周期を n , スピンの大きさを S , 1 スピンあたりの平均磁化を m とするとき

$$n(S - \langle m \rangle) = \text{integer} \quad (1)$$

である. これは必要条件であるので, 実際にプラトーが出現するかどうかはハミルトアンに含まれるパラメーターに依存し, 個々に調べなければならない. プラトーの出現消失の間の転移は, Okamoto [2] によって指摘されたように

Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 型になっていて, 転移点を数値計算データから検出するのはなかなか難しい. 本研究では, 数値的対角化データから転移点を精密に決定する方法を確立し, 具体的に $S = 1/2$ trimerized XXZ スピン鎖に適用する [13].

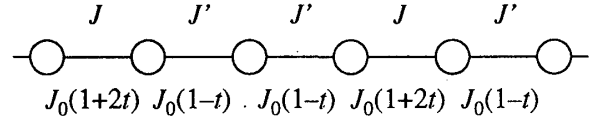


図 1: Trimerized XXZ 鎖. 下段の表示は (4) の形にしたときのもの.

$S = 1/2$ trimerized XXZ のハミルトニアンは

$$H = \sum_{j=1}^L \left\{ J' [h_{3j-2,3j-1}(\Delta) + h_{3j-1,3j}(\Delta)] + J h_{3j,3j+1}(\Delta) \right\} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} h_{lm}(\Delta) &= h_{lm}^{\perp} + \Delta h_{lm}^z \\ h_{lm}^{\perp} &= S_l^x S_m^x + S_l^y S_m^y, \quad h_{lm}^z = S_l^z S_m^z. \end{aligned} \quad (3)$$

で与えられ, 図 1 のようなものである. 少し書き換えて

$$H = J_0 \sum_{j=1}^L \left\{ (1-t) [h_{3j-2,3j-1}(\Delta) + h_{3j-1,3j}(\Delta)] + (1+2t) h_{3j,3j+1}(\Delta) \right\}, \quad (4)$$

$$J_0 = \frac{2J' + J}{3} \quad t = -\frac{J' - J}{2J' + J}. \quad (5)$$

¹E-mail:kokamoto@stat.phys.titech.ac.jp

²E-mail:kitazawa@stat.phys.kyushu-u.ac.jp

になり、ボソン化ハミルトニアンで表現すると

$$H = \frac{1}{2\pi} \int dx \left[v_s K (\pi \Pi)^2 + \frac{v_s}{K} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] + \frac{y_\phi v_s}{2\pi} \int dx \cos \sqrt{2} \phi \quad (6)$$

になる。ここで、 v_s はスピン波速度、 Π は位相変数 ϕ に共役で $[\phi(x), \Pi(x')] = i\delta(x - x')$ 、また、 v_s , K , and y_ϕ は J_0 , t and Δ as

$$v_s = \sqrt{3} J_0 \sqrt{AC} \quad K = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{C}{A}} \quad y_\phi v_s = \pi J_0 t (2 + \Delta) \quad (7)$$

$$A = \frac{1}{8\pi} \left(1 + \frac{5}{\sqrt{3}\pi} \Delta \right) \quad C = 2\pi \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}\pi} \Delta \right). \quad (8)$$

と表される。ただし、これらの表現は Δ について最低次と解釈すべきである。 ϕ は、スピン密度の空間的に速く変化する部分が

$$S_{\text{fast}}^z(x) = \frac{1}{3} \left\{ \cos \left(2k_F x - \frac{\pi}{3} + \sqrt{2}\phi \right) + \frac{1}{2} \right\} \quad (9)$$

ということの意味づけられる。

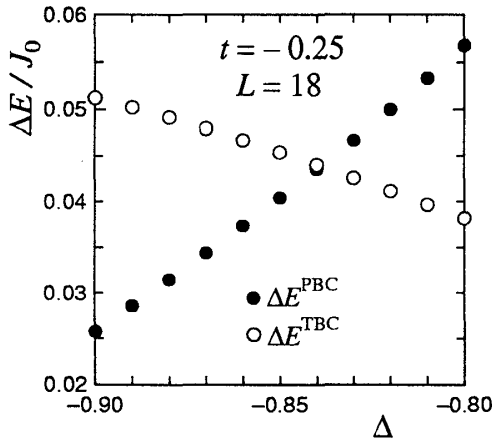
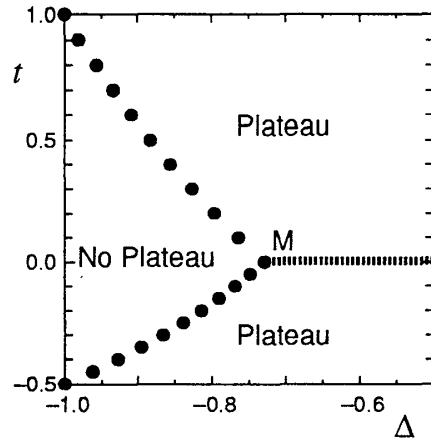
sine-Gordon ハミルトニアン (6) の励起スペクトルはパラメーターによってギャップを持つ場合 ($\cos$ 項が relevant で、プラトー状態に対応) と持たない場合 ($\cos$ 項が irrelevant で、非プラトー状態に対応) とがある。両者は繰り込まれた K の値で分類でき、今の状況では前者が $K < 4$ 、後者が $K \geq 4$ で、両者の間の転移は $K = 4$ の BKT 転移になっている。Nomura-Kitazawa (NM) [14] は角度 π だけひねった境界条件 (TBC) を用いることにより、有限系の数値対角化データから $K = 4$ の BKT 転移点を精密に決定する方法を提案した。彼らは磁化がゼロの場合の $K = 4$ の基底状態量子相転移について議論し、 $M = 0$ の TBC の励起と、 $M = 2$ の周期的境界条件 (PBC) での励起が交差する点が $K = 4$ の BKT 転移点であることを示した。BKT 転移点では有限サイズの対数補正効果が現れ、これが BKT 転移点の決定を困難にしているのが、NM の方法は対数補正効果まで考慮したものであるので精度よく BKT 転移点を決定できる。今は有限磁化のところの議論なので、違う磁化のエネルギーを比較するためには化学ポテンシャルの補正 (あるいは $E \rightarrow E - HM$ の Legendre 変換) が必要で、結局

$$\Delta E^{\text{TBC}} = E_0^{\text{TBC}} \left(\frac{M_s}{3} \right) - E_0^{\text{PBC}} \left(\frac{M_s}{3} \right) \quad (10)$$

と

$$\Delta E^{\text{PBC}} = \frac{1}{2} \left\{ E_0^{\text{PBC}} \left(\frac{M_s}{3} + 2 \right) + E_0^{\text{PBC}} \left(\frac{M_s}{3} - 2 \right) \right\} - E_0^{\text{PBC}} \left(\frac{M_s}{3} \right). \quad (11)$$

のレベル交差を見ればよい。NM はこの種のレベル交差がパラメーター変化に対して線形に起こることを示しているが、この線形交差は BKT 転移点の精密決定に極めて有用である。図 2 は $t = -0.25$ でスピン数 18 の場合で、レベル交差点より $\Delta_c(L = 18) = -0.8389$ が得られる。あとは、スピン数を 12, 18, 24 と変えて外挿すればよい ($1/L^2$ で精度よく外挿できる)。いろいろな t の値に対して同様のことを行って、図 3 の相図が得られる。

図 2: ΔE^{TBC} と ΔE^{PBC} のレベル交差.図 3: $\Delta - t$ 平面での相図.

相図の多重臨界点 M の値は $\Delta_M = -0.729$ である. $t = 0$ の場合は Bethe 仮説による厳密解があり, $K = 4$ に対応する値は $\Delta_M = -0.729043$ と求められ [11, 15, 16], 当然ながら本研究の値と一致している. なお, ボソン化の表現 (7) (8) と $K = 4$ からは $\Delta_M = -3\sqrt{3}\pi/21 = -0.777$ が得られるが, 真の値からのずれはボソン化によるパラメーターのずれのためである.

図 3 の相図で, M からの転移線の出だしは上下対称であるが, これはボソン化ハミルトニアン (6) が $t \leftrightarrow -t$ と $\sqrt{2}\phi \leftrightarrow \sqrt{2}\phi + \pi$ の変換に対して不変であることで説明できる. M から離れると転移線の上下対称性は崩れてくるが, それはももとのスピンハミルトニアンには $t \rightarrow -t$ 対称性がないためである. ボソン化の立場からは, $\cos(2\sqrt{2}\phi)$, $\cos(4\sqrt{2}\phi)$, $\dots$ などの高次項の存在のために上述の対称性が破れるためとして説明できる.

今のモデルは, Hida [1] の強磁性-強磁性-反強磁性 (F-F-AF) モデル

$$H_{\text{F-F-AF}} = \sum_{j=1}^L \{-J_{\text{F}}(S_{3j-2} \cdot S_{3j-1} + S_{3j-1} \cdot S_{3j}) + J_{\text{AF}} S_{3j} \cdot S_{3j+1}\} \quad (12)$$

と近い関係にある. 実際, (12) を書き換えると [2], 本研究のモデルを一般化したもの (trimerization の xy 成分と z 成分が異なる) になり, 本研究の方法が適用できる. その結果, パラメーター $\gamma \equiv J_{\text{F}}/J_{\text{AF}}$ に臨界点 $\gamma_c \simeq 15.4$ があり, $\gamma < \gamma_c$ ではプラトーが存在し, $\gamma \geq \gamma_c$ ではプラトーが存在しない, という結論が得られている [18]. $\gamma \rightarrow \infty$ では F-F-AF 鎖は $S = 3/2$ 鎖になると考えられるので, この結論は最も普通の $S = 3/2$ 鎖の磁化曲線にプラトーがないことと符合している.

謝辞

野村清英, 押川正毅, Andreas Honecker, 各氏には有用なコメントをいただいた. 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] K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994), 2359.
- [2] K. Okamoto, Solid State Commun. **98** (1996), 245.
- [3] T. Tonegawa, T. Nakao and M. Kaburagi, J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996), 3317.
- [4] T. Tonegawa, T. Nishida and M. Kaburagi, Physica B **246-247** (1998), 368.
- [5] K. Totsuka 997, Phys. Rev. B **57** (1998), 3454.
- [6] M. Oshikawa, M. Yamanaka and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **78** (1997), 1984.
- [7] T. Sakai and M. Takahashi, Phys. Rev. B **57** (1998), R3201.
- [8] Y. Narumi, M. Hagiwara, R. Sato, K. Kindo, H. Nakano and M. Takahashi, Physica B **246-247** (1998), 509.
- [9] W. Shiramura, K. Takatsu, B. Kurniawan, H. Tanaka, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Takizawa, H. Mitamura and T. Goto, J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998), 1548.
- [10] D. C. Cabra, A. Honecker and P. Pujol, Phys. Rev. B **58** (1998), 6241.
- [11] D. C. Cabra and M. D. Grynberg, Phys. Rev. B **59** (1999), 119.
- [12] A. Honecker, Phys. Rev. B **59** (1999), 6790.
- [13] K. Okamoto and A. Kitazawa, to be published in J. Phys. A: Math. Gen (1999): cond-mat/9809138.
- [14] K. Nomura and A. Kitazawa, J. Phys. A: Math. Gen. **31** (1998), 7341.
- [15] A. Honecker, private communications.
- [16] A. Honecker, <http://www.he.sissa.it/~honecker/roc.html> (back up; <http://thew02.physik.uni-bonn.de/~honecker/roc.html>).
- [17] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **47** (1981), 1840; (E) **48** (1982), 569.
- [18] A. Kitazawa and K. Okamoto, in preparation.