

一次元量子スピン系におけるフラストレーション誘起相転移

大阪大学大学院工学研究科 古賀昌久, 川上則雄

最近、低次元量子系においてフラストレーションに関する研究が盛んになされている。典型的な物質として知られている銅酸化物 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [1] においては、幾何学的な直交ダイマー構造に起因するフラストレーションにより、分散のない励起や磁化プラトーなどの興味深い現象が見出されており、その磁氣的性質を記述する Shastry-Sutherland 模型 [2, 3] が注目されている。さらに最近、 $T_N = 2.4\text{K}$ において反強磁性相転移を起こす直交ダイマー系 $\text{Nd}_2\text{BaZnO}_5$ ($J = 9/2$) [4] が合成され、フラストレート系における量子スピン ($S \geq 1/2$) の効果が注目されている。しかしながら、任意スピンをもつ直交ダイマー系の量子相転移に関しては、理論的な取り扱いが難しくなっており、今なお問題が残されたままとなっている。

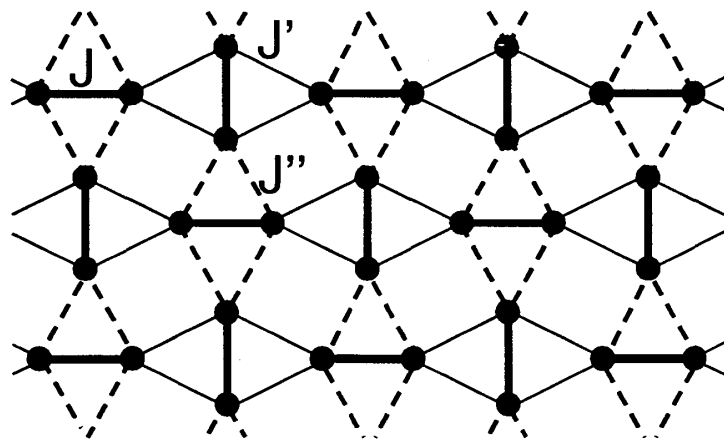


図 1: 直交ダイマー模型: 太線、実線、破線はそれぞれ交換相互作用の大きさの違いを表している。

われわれは以前、任意スピン S を持つ直交ダイマー鎖を取り扱い、交換相互作用の大きさを変化させることにより $(2S)$ 回一次相転移が起こることを明らかにした。[5] 特に、スピン $S = 1$ の一次元鎖においては、よく知られているダイマー相、プラケット相の間にフラストレーションに

より誘起されたハルディン相が存在することを明らかにした。このようなトポロジカルな性質を持つ相に鎖間相互作用を導入すると、スピングャップが減少し、ある臨界の相互作用を越えると反強磁性秩序へ相転移することが期待される。ここでは、図 1 に示される $S = 1$ の直交ダイマー模型を取り上げ、フラストレーションにより誘起されるハルディン相が鎖間相互作用によりどのように影響を受けるのか明らかにする。ここでは以下のハイゼンベルグハミルトニアンを用いて系の磁氣的性質について議論する。

$$H = J \sum_{(i,j) \in D_1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J' \sum_{(i,j) \in D_2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J'' \sum_{(i,j) \in D_3} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

D_1, D_2, D_3 は図中における太線、実線、破線により表される交換相互作用の組を表しており、相互作用の大きさは J, J', J'' で与えられる。一次元において実現しているダイマー相、ハルディン相、プラケット相が鎖間相互作用によりどのように変化するかを調べるために、 4×4 のサイトを持つクラスターに対する厳密対角化を行った。結果を図に示す。

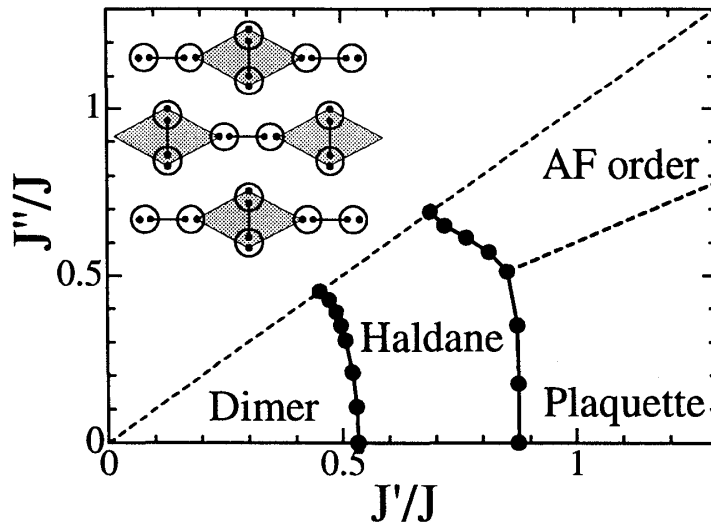


図 2: 直交ダイマー模型 ($S = 1$) の相図。図中の実線は一次転移を起こす相境界を示している。破線は二次転移を示す。

$J'' = 0$ の時、系は $S = 1$ 直交ダイマー鎖に帰着し、そこでは一次相転移により、ダイマー相、ハルディン相、プラケット相が分けられている。鎖間相互作用を導入することにより反強磁性相関が発達するが、 $J' \sim J'' \sim 0$ においてダイマー相が安定して存在している様子がわかる。これはダイマーボンドの直積により記述されるダイマー相がハミルトニアン (1) の厳密な固有状態であるためである。一方、ハルディン相は鎖間相互作用に対して安定であり、二次元系まで生き残っているの点は注目すべきである。このことは、Valence Bond Solid の描像 [6] を利用することに

より、理解することができる。ハルディン相においては、各格子点のスピン1のうち片方のスピン1/2が最近接格子点のスピン1/2とダイマーボンドを形成する。もう片方のスピンは次近接の格子点のスピンとプラケットシングレットを形成する(図2の挿入図)。そのため、この相はダイマーとプラケットの周期的な配置により形成された相とみなすことができ、鎖間相互作用に対して安定して存在することができる。一方、プラケット相においては、鎖間相互作用を導入することにより、反強磁性相関が発達し、スピギャップが減少する。スピン $S=1$ を持つ直交ダイマー系においては、スピンが大きく量子揺らぎが抑えられることから、 $S=1/2$ の場合[7, 8, 9]と異なり、古典的な反強磁性秩序へ相転移すると考えられる(図2)。ここで得られた結果は、小さい系に対する数値対角化で求めたものであるが、 $S=1$ を持つ直交ダイマー系の正しい相図を与えていると考えられる。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、有益な議論をして頂きました東京大学物性研究所の陰山洋さんに感謝致します。この研究の数値計算の一部は、京都大学基礎物理学研究所のスーパーコンピュータと東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを用いて行いました。計算機の運用に携わっている管理者に深く感謝致します。

参考文献

- [1] H. Kageyama *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82** 3168 (1999).
- [2] B. S. Shastry and B. Sutherland: Physica **108B** 1069 (1981).
- [3] S. Miyahara and K. Ueda: Phys. Rev. Lett. **82** 3701 (1999).
- [4] H. Kageyama *et al.*, preprint.
- [5] A. Koga and N. Kawakami, Phys. Rev. B **65** (2002) 214415.
- [6] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59** 799 (1987); Commun. Math. Phys. **115** 477 (1988).
- [7] A. Koga and N. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **84**, 4461 (2000).
- [8] Y. Takushima, A. Koga and N. Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 1369.
- [9] A. Laeuchli, S. Wessel and M. Sigrist, cond-mat/0201506.