

フラストレートした近藤ネックレス模型における磁場誘起相転移

東京理科大学 理学部 山本 貴博

1 モデル ハミルトニアン

近年、スピン間相互作用にフラストレーションのある量子スピン系における磁場誘起相転移現象が注目を集めている。本稿では、近藤絶縁体の有効ハミルトニアンである近藤ネックレス模型:

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^L [\sigma_j \cdot \sigma_{j+1} + \lambda \sigma_j \cdot \sigma_{j+2}] + J_K \sum_{j=1}^L \sigma_j \cdot S_j \quad (1)$$

の磁場誘起相転移現象について報告する。ここで、 σ は伝導電子スピン、 S は磁性原子の f 電子スピンであり、共に大きさ $1/2$ である。また、 J, J_K は反強磁性的な交換相互作用、 λ はフラストレーションの強さを与えるパラメータである。この 1 次元量子スピン模型の基底状態は、有限の近藤相互作用 J_K が存在する限り、無秩序な近藤スピン液体相であることが知られている。それではフラストレーションの影響は何処にどの様に現れるのであろうか？ 結果を先に述べると、フラストレーションの影響は磁場中で顕著となり、磁化曲線上にプラトーやカuspとして現れる。本稿では、まず、強いフラストレーションの影響による朝永・ラッティンジャー流体の不安定性、すなわち“非プラトー $\leftrightarrow$ プラトー転移”について報告する [1]。さらに、弱磁場領域に出現する磁化カuspの出現機構を近藤スピン液体相からの素励起のエネルギー分散構造から明らかにする [2]。

2 フラストレートした近藤ネックレス模型の磁化曲線

密度行列繰り込み群 (DMRG) の方法は、1 次元量子多体系の基底状態の物理量を高精度に決定することのできる数値計算法であり、フラストレーションがある場合や磁場中でさえも安定した結果を与えてくれる。図 1 に DMRG によって計算された近藤ネックレス模型 (1) の磁化曲線を示す。図 1 から明らかなように、フラストレーションのない場合 ($\lambda = 0.0$)、磁化曲線は有限の値 (近藤シングレットギャップ) から立ち上がり連続かつ滑らかに成長する。つまり、磁化 $0 < m < 1$ を与える磁場中において相転移は起こらず、系は常にギャップレス相にある。通常、1 次元量子系において低エネルギー励起にギャップがなければ、系は朝永・ラッティンジャー (TL) 流体として振る舞うと信じられている。しかしながら、近藤ネックレス模型の

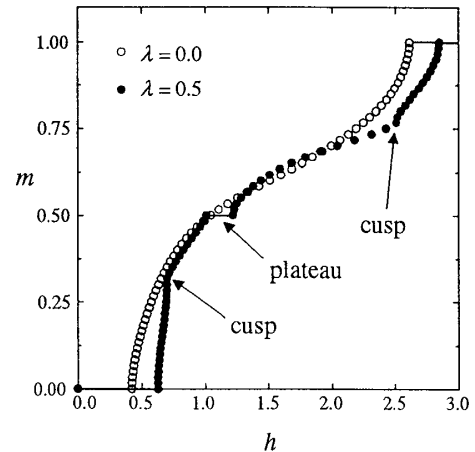


図 1: 近藤ネックレス模型の磁化曲線

ように局在 f 電子スピンの存在する場合には、系が TL 流体であるか否かは自明ではない。この問題については次節で触れる。一方、フラストレーションが大きい場合、磁化曲線の様相は一変する。図 1 中の黒丸 ($\lambda = 0.5$) で示されるように、磁化プラトーや磁化カスプ型の特異性が出現している。このように、磁化曲線に出現するカスプ特異性を明瞭に発見できることも DMRG の大きな利点の 1 つであると言えよう。これらの特異性の出現は、いずれもフラストレーションの影響であり、その出現メカニズムの解明が本研究の主目的である。

3 飽和磁化の半分に出現する磁化プラトー

伝導電子スピン σ と f 電子スピン S の各磁化成長を調べてみると、孤立した f 電子スピンの方が伝導電子スピンよりも外部磁場に対して応答が速いことが分かる。また、系全体の磁化が飽和磁化の半分 ($m = 1/2$) まで達したときには、 f 電子スピンはほぼ飽和状態にあり、そのスピン自由度は失われている。すなわち、 $m = 1/2$ に磁化した“フラストレートした近藤ネックレス模型”は有効的に“次近接相互作用 λ をもつ $\sigma = 1/2$ Heisenberg 鎖”として振舞うことが予測される。この模型の基底状態は、 $\lambda > 0.2411$ 領域で自発的並進対称性の破れを伴う二重縮退したダイマー状態となり、その低エネルギー励起にギャップが生じる [3]。すなわち、フラストレートした近藤ネックレス模型における $m = 1/2$ プラトー相での安定スピン配置は、 f 電子スピンの磁場方向に揃い、伝導電子スピンの隣接スピンとシングレット・ダイマーを形成した配置である。こうして、 $m = 1/2$ に磁化した系は、ボソン化法によって量子 sine-Gordon 模型

$$\mathcal{H}_{SG} = \int dx \left[\frac{\pi v_F K}{2} \Pi^2(x) + \frac{v_s}{2\pi K} (\partial_x \phi(x))^2 - \frac{2g}{(2\pi\alpha)^2} \cos(\sqrt{8}\phi(x)) \right] \quad (2)$$

にマップすることができる [2, 3, 4]。量子 sine-Gordon 模型は繰り込み群の解析から、ギャップレス (TL) 相からギャップフル (ダイマー) 相へコスタリッツ・サウレス (KT) 型の相転移を示すことが知られている。KT 転移点では様々な物理量に対数補正が残るために、一般に、転移点を数値的に高精度に決定することは極めて困難である。そこで我々は、その困難を克服した“レベルスペクトロスコピーの方法 [3]”により相図を決定し、臨界点での臨界現象を調べた。その結果、TL 相とダイマー相の間の KT 転移点は $\lambda_c = 0.3419$ と得られた。また、KT 転移点 λ_c 上でセントラルチャージが $c \approx 1$ であることから、非プラトー相 ($\lambda < \lambda_c$) において、近藤ネックレス模型が TL 流体として振舞うことが確かとなった。

4 弱磁場領域に現れる磁化カスプ

2 節で示した磁化曲線 (図 1) を見てみると、磁化 $m = 1/2$ プラトールの出現前後に磁化カスプが出現している。強磁場領域 ($1/2 < m < 1$) における磁化カスプの出現理由は、次のように説明される。前節で述べたように、この強磁場領域において系は有効的に次近接相互作用をもつ $\sigma = 1/2$ XXZ 鎖として振舞う。したがって、この領域での磁化成長は本質的に“次近接相互作用をもつ $\sigma = 1/2$ XXZ 鎖”と同等である。この XXZ 鎖の強磁場領域に磁化カスプが出現することは、奥西らによって明らかにされ、強磁場極限からのマグノン描像によって定性的な解釈が与えられているので、そちらを参照していただきたい [5]。

この節では、弱磁場領域 ($0 < m < 1/2$) に出現する磁化カスプについて説明する。この領域では、局在磁性原子の f スピン自由度は凍結しておらず、そのスピン励起が磁化成長に顕著に関与する。1 節で述べたように、この系のゼロ磁場基底状態は常に近藤スピン液体であるので、弱

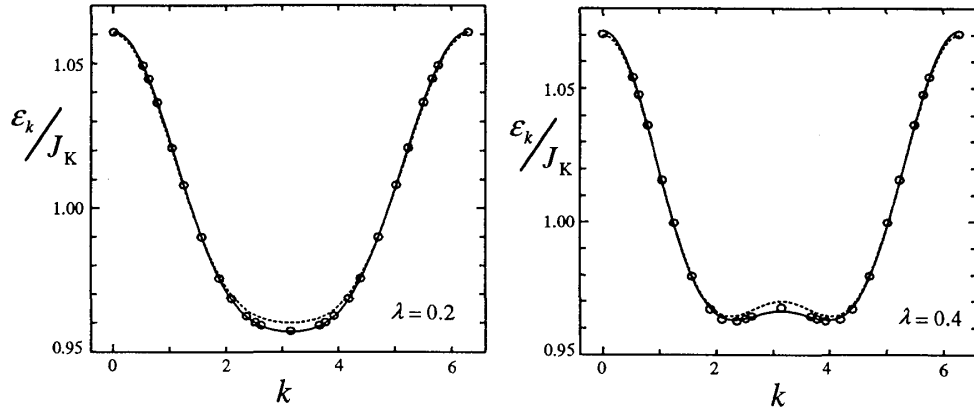


図 2: 弱磁場中においてトリプレット励起子が従うエネルギー分散 ($J/J_K = 0.1$)。点線が強近藤結合展開によって得られたエネルギー分散 [(4) 式] であり、実線は J/J_K に関する 2 次の補正を考慮した場合のエネルギー分散である。○ 記号は厳密対角化法によって得られたシングレット-トリプレット励起エネルギー $E_k(S_{\text{tot}}^z = 1) - E_0(S_{\text{tot}}^z = 0)$ である。

磁場領域でのスピン励起はシングレット状態からトリプレット状態への励起によって良く記述されるであろう。この励起を明確に表現するために、シングレット状態とトリプレット状態を生成する計 4 種類のボンド演算子 $s_j^\dagger, t_\alpha^\dagger$ ($\alpha = x, y, z$) を導入する。これらのボンド演算子を用いて、伝導電子スピンと局在 f 電子スピンはそれぞれ次のように表現される [6]。

$$\sigma_j^\alpha = \frac{1}{2} \left(-s_j^\dagger t_{\alpha,j} - t_{\alpha,j}^\dagger s_j - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{\beta,j}^\dagger t_{\gamma,j} \right), \quad S_j^\alpha = \frac{1}{2} \left(s_j^\dagger t_{\alpha,j} + t_{\alpha,j}^\dagger s_j - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{\beta,j}^\dagger t_{\gamma,j} \right). \quad (3)$$

ここで、ボンド演算子はフェルミオンであってもボソンであっても良い。我々の議論で重要なことは、ボンド演算子そのものの統計性ではなく、シングレット-トリプレット励起の生成子をフェルミオンで記述することである。

近藤相互作用が大きい場合 ($J_K \gg J$) の磁化過程を議論する際には、4 種類のボンド演算子のうち、 $s_j^\dagger$ と $u^\dagger = -(t_x^\dagger + it_y^\dagger)/\sqrt{2}$ のみ考慮すれば十分である。このとき、系は 1 種類のハードコア・ボソン $\gamma_j^\dagger \equiv u_j^\dagger s_j$ で表現され、Jordan-Wigner 変換、 $\xi_j^\dagger = \gamma_j^\dagger \exp[i\pi \sum_{n=1}^{j-1} \gamma_n^\dagger \gamma_n]$ によりフェルミオン系へマップされる。その基底状態は完全な近藤スピン液体状態 $|0\rangle = s_1^\dagger s_2^\dagger \cdots s_L^\dagger |\text{vac}\rangle$ であり、1 粒子励起状態はトリプレット粒子が結晶中を平面波として遍歴する状態 $|k\rangle = \xi_k^\dagger |0\rangle$ である。ここで、 $\xi_k^\dagger = L^{-1/2} \sum_{j=1}^L \exp(ikj) \xi_j^\dagger$ はトリプレット励起を記述する Jordan-Wigner フェルミオンの生成演算子である。このトリプレット励起子の 1 粒子エネルギー分散は

$$\epsilon_k/J_K = 1 + (J/2J_K)[\cos k + \lambda \cos(2k)] \quad (4)$$

で与えられる (図 2 参照)。この 1 粒子エネルギー分散の形状からカスプ出現を説明する。本来、トリプレット励起子の数が増加するとそれらの間の相関を考慮しなければならないが、小さな磁化領域 ($m = \sum_k \langle \xi_k^\dagger \xi_k \rangle / L \ll 1$) ではトリプレット励起子は希薄であるので 1 粒子描像は極めて有効である。フラストレーションが小さい場合、トリプレット励起子のエネルギー分散の形状は $k = \pi$ に 1 つの底を有する余弦型である (図 2(a))。一方、フラストレーションが大きくなると、 $k = \pi$ の極小値は局所的な極大値へと変化し、エネルギー分散の形状は 2 つの底をもつ二重底型となる (図 2(b))。この二重底の出現が磁化カスプ特異性の出現の原因である。すなわち、磁場 h

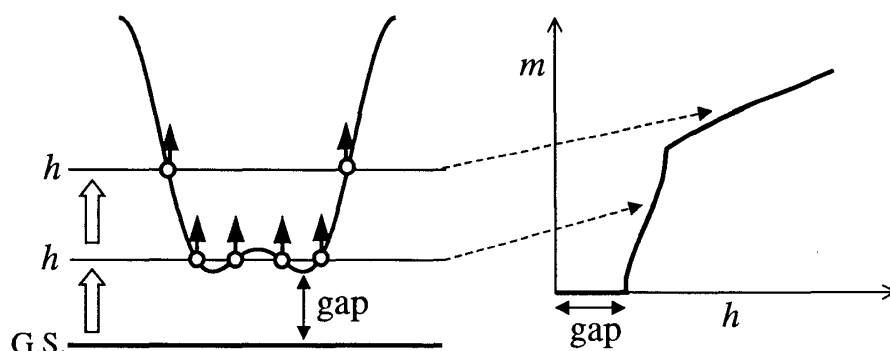


図 3: 1 粒子エネルギー分散と磁化曲線の関係

が増加（すなわち、フェルミレベルが上昇）し、 h が $k = \pi$ の局所的な最大値 h_c に達したとき、エネルギー分散を横切るフェルミ点の数が4点から2点へ減少する（図3左）。これに応じて粒子数変化（磁化曲線の傾き）に「飛び」が生じ、磁化曲線にカusp特異性が出現する（図3右）。こうして、弱磁場領域における磁化カuspの出現メカニズムは、トリプレット励起子の1粒子エネルギー分散の形状から自然に理解された。

また、磁化カusp近傍での $h < h_c$ において、磁化は $m_{\text{cusp}} - m \propto \sqrt{h_c - h}$ として振る舞い、微分磁化が $dm/dh \propto (h_c - h)^{-1/2}$ のように発散することがエネルギー分散から分かる。一方、 $h > h_c$ においては、磁化の振る舞いが $m - m_c \propto (h - h_c)$ であることから微分磁化は発散しない。

謝辞

本研究は、石井 力 教授, 井出 紘一郎 氏, 眞子 留美 氏, 森 芳弘 氏との共同研究である。本研究を遂行するに当たって様々な助言を下さった飛田 和男 教授, 二国 徹郎 氏, 中村 正明 氏, 松下 康弘 氏, 奥西 巧一 氏, 浅野 真誠 氏に深く感謝致します。

参考文献

- [1] T. Yamamoto and C. Ishii: Prog. of Theor. Phys. Suppl. **145** (2002), 64; T. Yamamoto, K. Ide and C. Ishii: Phys. Rev. B **66** (2002), 104408.
- [2] T. Yamamoto, R. Manago, Y. Mori, and C. Ishii: submitted to Phys. Rev. B; T. Yamamoto and C. Ishii: to be published in Physica B.
- [3] K. Nomura and K. Okamoto: J. of Phys. A, Math. Gen. **27** (1994), 5773.
- [4] F.D.M. Haldane: Phys. Rev. B **25** (1982), 4925; K. Kuboki and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987), 3126; T. Tonegawa, T. Harada and M. Kaburagi: J. Phys. Soc. Jpn. **61** (1992), 4665.
- [5] K. Okunishi, Y. Hieida and Y. Akutsu: Phys. Rev. B **60** (1999), R6953; K. Okunishi: Prog. of Theor. Phys. Suppl. **145** (2002), 119.
- [6] S. Sachdev and R. N. Bhatt: Phys. Rev. B **41** (1990), 9323.