

$S = 1$ カゴメ反強磁性体における格子歪みと異方性による量子相転移

埼玉大学 理学部 飛田 和男¹

1 はじめに

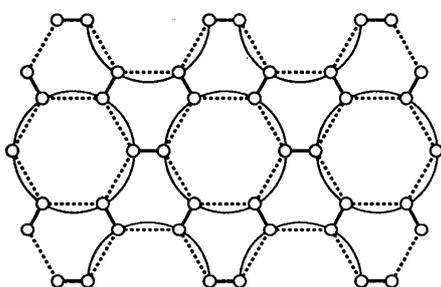


図 1: HSS 状態の模式図。太い実線で結ばれた 2 つの $S = 1/2$ スピン (o) が 1 つの $S = 1$ スピンを構成している。細い実線で結ばれた 6 つの $S = 1/2$ スピンがシングレットを構成している。

和田ら [1] は $S = 1$ カゴメ格子反強磁性体と考えられる有機磁性体 m -MPYNN·BF₄ の磁性的性質を調べ、帯磁率の測定から有限のスピンギャップを持つことを示した。これに対し、著者は $S = 1$ カゴメ格子反強磁性体の基底状態として hexagonal singlet solid (HSS) 描像を提唱した [2]。この状態はそれぞれの $S = 1$ スピンを 2 つの $S = 1/2$ スピンの対称化積と見なしたとき、これらの $S = 1/2$ スピンがそれぞれの六角形のまわりでシングレット状態を作った状態と考えられ、1 次元 $S = 1$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルのハルデン状態の 2 次元版と見なすことができる [3]。後者については、格子歪みや異方性による量子相転移が

知られており [3, 4, 5]、それらの研究によってハルデン状態の理解が深まったことを考えると、 $S = 1$ カゴメ反強磁性体についても同様な効果を調べることはこの系の基底状態の理解をより深めるものと期待できる。ここでは、実験的にも観測されている $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 型の格子歪み [2] および 1 サイト異方性の効果を数値的手法を中心に調べた。

具体的には次のハミルトニアンで与えられる異方性と格子歪みのある $S = 1$ のカゴメ格子反強磁性体を考える、

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_C + \sum_i DS_i^{z2}, \quad \mathcal{H}_\alpha = J_\alpha \sum_{\langle i,j \rangle \in \alpha} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

ここで \mathbf{S}_i は $S = 1$ のスピン演算子であり $\sum_{\langle i,j \rangle \in \alpha}$ は図 2 に示すような 3 種の六角形の辺上のボンドについての和を表す ($\alpha = A, B$ または C)。以下、 $J_A = 1$ 、 $J_B = J_C = \alpha$ ($0 < \alpha \leq 1$) とする。

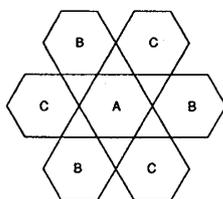


図 2: 歪んだカゴメ格子。

2 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 格子歪み

¹ E-mail: hida@phy.saitama-u.ac.jp

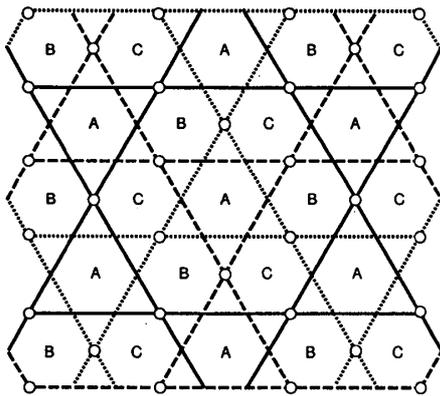


図 3: $\alpha \ll 1$ で生き残ったスピン (o) とその間の有効相互作用。

$J_A \gg J_B = J_C (\equiv \alpha J_A)$ の場合、HSS 状態は明らかに壊される。A の六角形のまわりの 6 つの $S = 1$ スピンは 2 つの $S = 1/2$ の自由度に分割されることなく、そのままシングレットクラスターを作る。従って、一様な $S = 1$ カゴメ格子ハイゼンベルグ反強磁性体の基底状態が HSS 状態なら、中間の α で量子相転移を起こすはずである。

$\alpha \ll 1$ の場合、強く結合したスピンの自由度は死んでいるので生き残っているスピンは全体の $1/3$ である。これらのスピンは図 3 に示すように、再びより大きなカゴメ格子を形成している。これらの間の有効相互作用は

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = J_{\text{nn}} \sum_{\langle \text{nn} \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + J_{\text{nnn}} \sum_{\langle \text{nnn} \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + J_{\text{nnnn}} \sum_{\langle \text{nnnn} \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 $\sum_{\langle \text{nn} \rangle}$ 、 $\sum_{\langle \text{nnn} \rangle}$ 、 $\sum_{\langle \text{nnnn} \rangle}$ はそれぞれ生き残ったスピンの作るカゴメ格子上での最近接、次近接、次次近接格子点対についての和であり、 $J_{\text{nn}} = 0.001697\alpha^2$ 、 $J_{\text{nnn}} = 0.074233\alpha^2$ 、 $J_{\text{nnnn}} = -0.003394\alpha^2$ で与えられる。この内一番強いのは次近接相互作用なので、他の相互作用を無視すると、図 3 に示すように、さらに大きな 3 つのカゴメ格子になる。従って、生き残ったスピンはこの大きなカゴメ格子上で再び HSS 状態 (large-HSS 状態) を作ると期待される。明らかにこの状態は HSS 状態とは異なった構造を持つ。

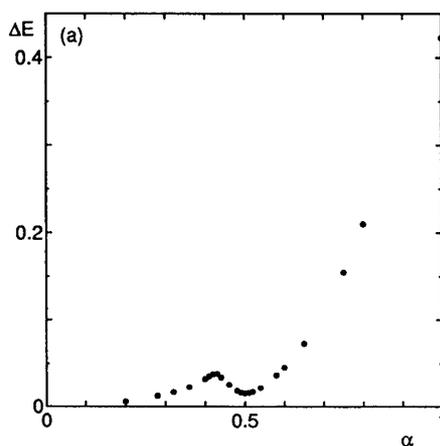


図 4: シングレット・トリプレットギャップの α 依存性。

この相転移を確認するために $N = 18$ のクラスターについての数値対角化計算を行った。シングレット・トリプレットギャップ ΔE の α 依存性は図 5 に示すように $\alpha \simeq 0.50$ で極小値を持つことからこのあたりで二つの相の間の相転移があることが期待される。この転移の存在は、逆に言えば一様な $S = 1$ カゴメ反強磁性体の基底状態が HSS 状態であることを反映している。

3 1 サイト異方性 D

格子歪みがなく ($\alpha = 1$)、一サイト異方性 D のみが存在するときも、 $D \gg J$ では各サイトで $S_z = 0$ の状態しか許されなくなるため、HSS 状態が壊されることが期待される。これは $S = 1$ AFHC での Haldane-Large- D 転移に対応し、この転移が存在することも、一様系の基底状態が HSS 状態として記述できることを反映している。

研究会報告

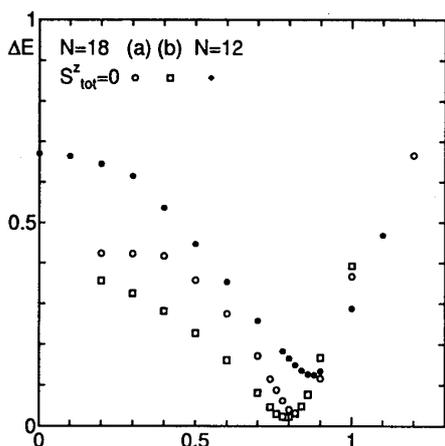


図 5: $S_{\text{tot}}^z = 0$ 励起状態のギャップの D 依存性。

$N = 12$ および 2 種の $N = 18$ のクラスターに対する数値対角化の結果、図 5 に示すように、 $S_{\text{tot}}^z = 0$ の励起状態へのエネルギーギャップ ΔE は $D \sim 0.8$ あたりで極小を持ち、極小値はサイズと共に小さくなる。これは、HSS 状態から Large- D 状態への量子相転移の存在を示唆している。

4 基底状態相図

一般的に $D > 0$ かつ $0 < \alpha < 1$ の場合、 $N = 18$ のクラスターだけが許されるので、系統的なサイズ依存性の解析はできないが、このクラスターのエネルギーギャップが極小になる点が大まかな相図を見積もると図 6 のようになる。 $\alpha \sim D \sim 0.8$ あたりに少しリエントラントな振る舞いが、 $\alpha \sim 0.5D \sim 0.1$ あたりに

小さな中間相が見られるが、これらが熱力学的極限で意味のある振る舞いかどうか不明である。

2 節で述べた強結合近似 ($\alpha \ll 1$) の成り立つ領域で、large-HSS 状態のこわれる点を見積もると $D_c \simeq 0.06\alpha^2$ となる。これは図 6 の点線として示してある。

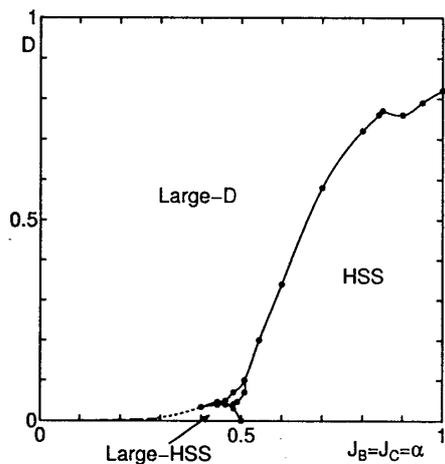


図 6: $N = 18$ の数値計算から予測される相図。点は数値計算の結果、点線は強結合近似 $\alpha \ll 1$ からの結果であり、破線と実線はそれらをつないだ目安である。

5 まとめ

$S = 1$ カゴメ反強磁性体の基底状態は $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 格子変形や 1 イオン異方性によって容易に壊されることが分かった。これは、一様・等方的な $S = 1$ カゴメ反強磁性体の基底状態が単純な非磁性状態でなく、これらの摂動によって壊される特定の構造を持った状態であることを示唆している。この性質は最初に述べた HSS 状態が $S = 1$ カゴメ反強磁性体の基底状態と考えると自然に理解できる。特に、 $J_A = 1, J_B = J_C = \alpha$ の $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 格子変形によって生じた新しい相は、再び大きなスケールでの HSS 構造を持ち、 D によって HSS 構造が壊された large- D 相との間に相境界をもつ。これは、 $S = 1$ のハルデン系でダイマー相と large- D 相

の間に相転移がないのと対照的である [5]。

参考文献

- [1] N. Wada, T. Kobayashi, H. Yano, T. Okuno, A. Yamaguchi and K. Awaga: J. Phys. Soc. Jpn. **66** 961 (1997).
- [2] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **69** 4003 (2000), *ibid.***70** 3673 (2001), *ibid.***71** 1027 (2002).
- [3] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb and H. Tasaki: Commn. Math. Phys. **115** (1988) 477; Phys. Rev. Lett. **59** 799 (1987); M. den Nijs and K. Rommelse: Phys. Rev. B **40**, 4709 (1989), H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **66**, 798 (1991).
- [4] I. Affleck and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. **B36**, 5291 (1987).
- [5] T. Tonegawa, T. Nakao and M. Kaburagi: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3317; W. Chen, K. Hida and B. C. Sanctuary: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 237.