

氏 名	村 尾 晃 平
授 与 学 位	博 士 (工 学)
学位授与年月日	平成 6 年 3 月 25 日
学位授与の根拠法規	学位規則第 5 条第 1 項
研究科, 専攻の名称	東北大学大学院工学研究科 (博士課程) 応用物理学専攻
学 位 論 文 題 目	擬 1 次元反強磁性体 CsCoCl ₃ の磁場中の 静的及び動的性質
指 導 教 官	東北大学教授 猪苗代 盛
論 文 審 査 委 員	東北大学教授 猪苗代 盛 東北大学教授 渡邊 剛 東北大学教授 宮崎 照宣 東北大学教授 梶谷 剛 東北大学助教授 松原 史卓

論 文 内 容 要 旨

六方晶擬 1 次元反強磁性体 ABX₃ 型の物質は、ハルデーギャップなどの量子効果や、相転移におけるフラストレーションの効果などの側面から精力的に研究されてきている。その中でも CsCoCl₃ は最も興味深い物質であり、現在も盛んに研究されている。特に磁場中での磁性についての研究は始まったばかりであり、実験的、理論的研究が期待されている。

第 1 章では CsCoCl₃ に関するこれまでの実験のおよび理論的解析について述べた。CsCoCl₃ は Co²⁺ が磁性を担っており、有効スピン $S=1/2$, c 軸方向に異方性が強い反強磁性体である。また、各々の鎖は ab 面内で三角格子を形成しており、反強磁性相互作用によりフラストレーションが起こる。これらの性質に注目して、様々な実験的手段によりゼロ磁場中の静的及び動的性質が調べられてきた。しかしこの物質では交換相互作用が大きいため、磁場効果の研究には数十テスラの強磁場が必要であり、磁場中での静的、動的性質に関する研究はほとんどない。

第 2 章では本研究の目的について述べた。第 1 の目的は、磁場中の静的性質として、実験で得られている磁化過程の説明をすることである。第 2 の目的は、磁場中のスピン動力学の特徴を明らかにすることである。縦磁場および横磁場中の励起エネルギーの分散関係と動的スピン相関関係に注目する。これらは非弾性中性子散乱と関係して興味深い。

第 3 章では磁化過程の解析をした。強磁場中での磁化の測定が行われ、磁化の始まりに跳びとヒステリシスを持つ非線形の特徴的な磁化曲線が得られている (図 1 の実線)。この結果に対する解

積が試みられたが満足のいくものではなかった。磁化過程には、1次元鎖の量子効果と鎖間相互作用によるフラストレーションの効果の双方が重要であると考えられる。そこで、本研究ではこれらの効果を取り入れた新しいシミュレーション法を開発した。その方法は、まず鎖間相互作用を分子場近似で取り入れた1次元鎖の固有状態を対角化の手法を用いて求め、次にそれらの固有状態の中からモンテカルロシミュレーションによって1つの状態を選ぶというものである。この方法によって、実験で得られた全ての特徴を再現することができた(図1の黒丸)。

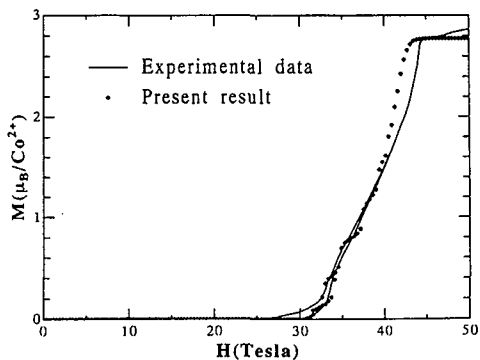


図1 磁化曲線

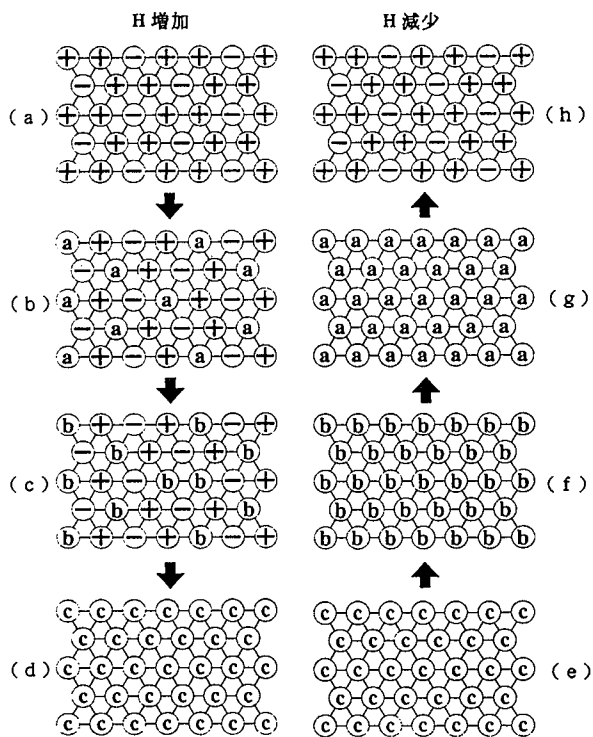


図2 ab面内で見た磁化過程。+と-はネール状態のアップおよびダウンスピンを表す。鎖の磁化は $M^z = 1/N, 2/N, 3/N, \dots$ に対応してa, b, c, ...のようにアルファベット順に表現してある

場近似で取り入れた1次元鎖の固有状態を対角化の手法を用いて求め、次にそれらの固有状態の中からモンテカルロシミュレーションによって1つの状態を選ぶというものである。この方法によって、実験で得られた全ての特徴を再現することができた(図1の黒丸)。

磁化過程のメカニズムを微視的な観点から説明するために、シミュレーションで得られた鎖の磁化のスナップショットをab面内の三角格子上に描いた。磁化のゆるやかな立ち上がり部分では、受けている分子場が有効的にゼロになっているような鎖が磁化されており、全体の約1/3の鎖の磁化が進行することがわかった(図1(b), (c))。次に磁化の跳びの部分では、全ての鎖が一樣に磁化された状態になり、飽和するまで一樣なまま磁化が進行することがわかった(図2(d))。磁場が減少するときにはその一樣な状態が磁化の跳びの部分よりも低磁場まで残るため、ヒステリシスが生じることがわかった(図2(e), (f), (g))。

第4章では縦磁場中の励起について述べた。鎖の磁化 M^z ごとの最低エネルギーバンドの分散関係を数値的に求めたところ、 M^z が大きくなるにつれて波数 $k = \pi/2$ についての対称性が消失することがわかった。また、 $S^{xx}(Q, \omega)$ を数値的に求めたところ、低磁場($h_z = 0.5J$)では $M^z = \pm 1$ の縮退が解け、2つの相似のピークが見

られた (図 3(a))。中程度の磁場 ($h_z = h_c$) では幅広いピークが得られた (図 3(b))。高磁場 ($h_z = h_s$) では波数 Q が 0 から π に向かうにつれ $\omega \sim 0.5J$ から 0 に移動する中心に鋭いピークを持つ裾の広がったピークが現れた (図 3(c))。鋭いピークは飽和スピン状態から 1 スピン反転への、裾のヒステリシスは 1 スピン反転から 2 スピン反転への遷移によるものであることがわかった。

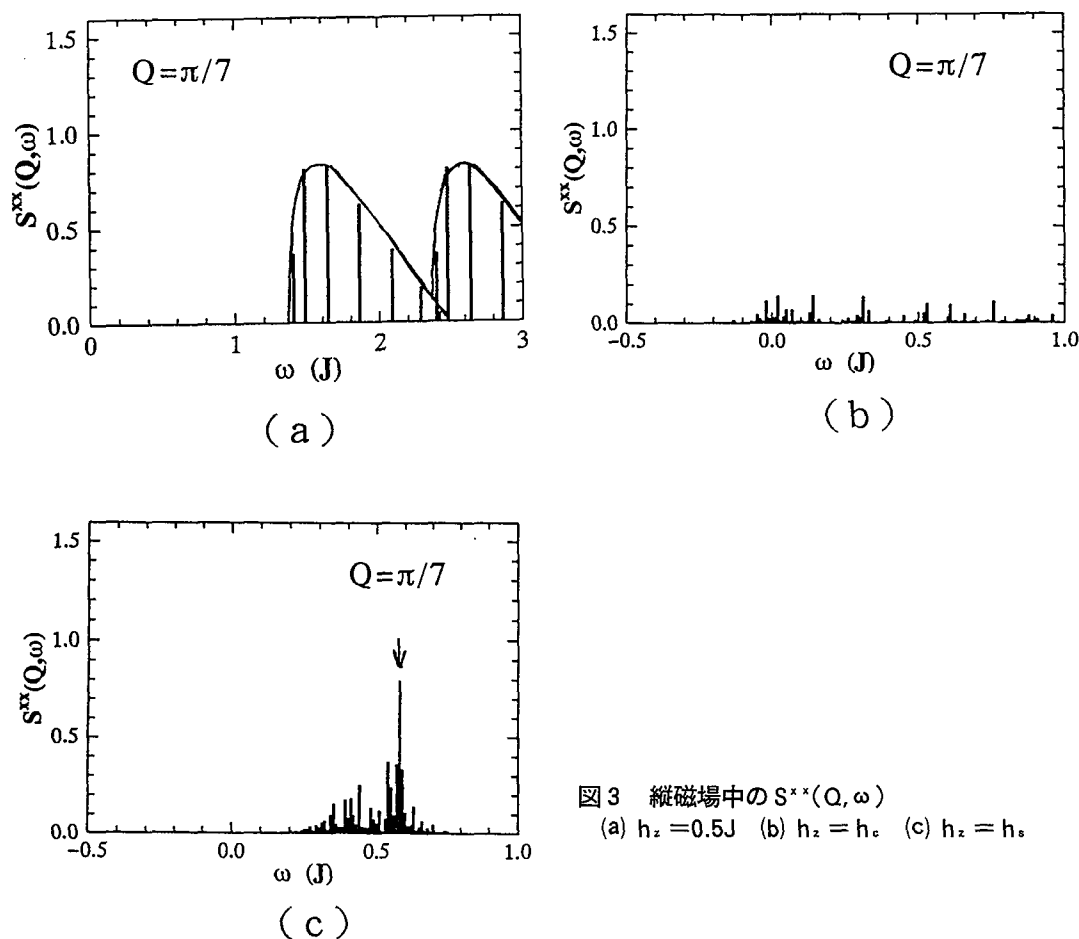


図 3 縦磁場中の $S^{xx}(Q, \omega)$
 (a) $h_z = 0.5J$ (b) $h_z = h_c$ (c) $h_z = h_s$

第 5 章では横磁場中の励起について述べた。磁場の強さが $h_x \ll 2J$ の場合、基底状態はほとんど影響を受けないが、励起状態は $M^z = 0, \pm 1$ の状態間に結合が生じる。そこで基底関数として、イジング状態の磁壁が 2 つのものに限って固有方程式を導いた。その結果、 $M^z = +1$ と $M^z = 0$ の半数のイジング状態からなる基底関数の集合 a と $M^z = -1$ と $M^z = 0$ の半数からなる集合 b を対称および反対称に結合することによって、2 種類の方程式に分離することができた (図 4)。

対称な解は $S^{xx}(Q, \omega)$ に、反対称な解は $S^{yy}(Q, \omega)$ に寄与することがわかった。波数 $0 \leq Q < \pi/2$ では $S^{xx}(Q, \omega)$, $S^{yy}(Q, \omega)$ とともに鋭いピーク (bound state) の高エネルギー側に幅広いピーク (soliton-pair state) が磁場の増加と共に成長した。 $\pi/2 < Q \leq \pi$ では $S^{xx}(Q, \omega)$ のピーク

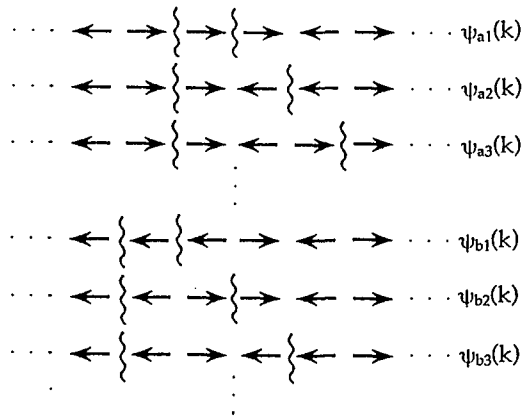


図4 基底関数の分類。横方向がc軸方向。図示したイジング状態のフーリエ変換したものを $\Psi_{a1}(k)$

は低エネルギー側に広がり、特徴的な磁場依存性を示した。以上の結果から、特に $S^{yy}(Q, \omega)$ の $\pi/2 \leq Q \leq \pi$ でのピークの磁場依存性が最も特徴的である(図5)。さらに、鎖間相互作用を取り入れた計算をした。離散的なピーク(Zeeman ladder)が現れ、横磁場の増加にともなってそれらのピークが変則的に広がった。これらの結果は磁場中のスピンドYNAMIKSの研究の指針にな

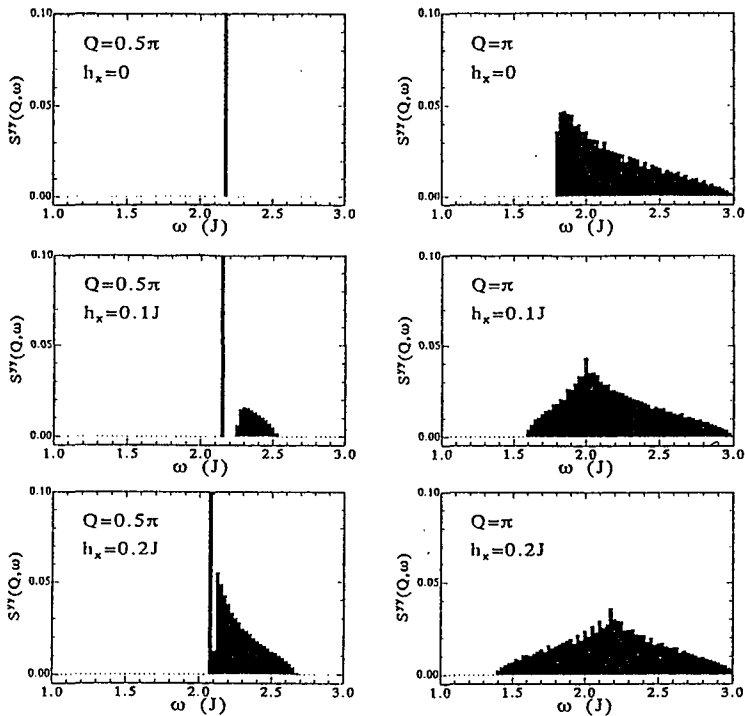


図5 横磁場中の $S^{yy}(Q, \omega)$ の磁場依存性

と思われる。

第6章では本研究の結論について述べた。

磁場中の静的性質として磁化過程の解析をした。1次元の量子効果と鎖間相互作用のフラストレーションの複合した効果を取り入れることにより、ヒステリシスを伴う非線形の磁化曲線を説明することができた。

磁場中の動的性質として縦磁場および横磁場中の励起について調べた。縦磁場中では低磁場で $M^z = \pm 1$ の縮退が解けて2つのピークが見られること、高磁場で飽和状態からスピンの反転する特徴的なピークが見られることがわかった。横磁場中の励起について、 $M^z = 0, \pm 1$ の基底関数を2つに分類してそれらの対称および反対称な結合が固有関数になることがわかった。特に $S^y(Q, \omega)$ では反対称な解が寄与し、 $\pi/2 \leq Q \leq \pi$ でピークの特徴的な磁場依存性が見られることがわかった。

審査結果の要旨

CsCoCl₃の六方晶結晶中の磁性イオン Co²⁺ は c 軸方向に沿って強い反強磁性相互作用があり、また c 軸方向に強い異方性を持っている。この反強磁性鎖は結晶の ab 面内で三角格子を形成しており、鎖間に弱い反強磁性相互作用が存在する。この物質は磁性の研究上、典型的な擬一次元イジング-ハイゼンベルク型反強磁性体とみなされており、様々な実験的手段によりゼロ磁場中の静的及び動的性質が調べられてきたが、強い磁場中での研究はほとんどなかった。最近交換相互作用の大きさと匹敵する強磁場の実験が可能になりつつあり、この物質の強磁場中の磁気的性質が注目されている。本論文は理論的に、かつまたコンピュータ・シミュレーションによってこれらの性質を明らかにしたものであり、全編6章よりなる。

第1章は序論である。

第2章では本論文の目的を述べている。

第3章ではこの物質の静的な性質の研究として強磁場中の磁化過程を研究している。ここでは一次元鎖内の量子力学的な効果と鎖間相互作用によるフラストレーションの効果を取り入れた新しいシミュレーション法を提案し、理論的な解析を行った。その結果、それまで合理的な説明がつかなかった磁化曲線の実験結果を、理論的な計算で見事に再現することに成功した。さらに磁化過程及びそれに伴って起こるヒステリシス現象に対する微視的な描像を与えている。

第4章では縦磁場を印加した場合の動力的スピン相関関数について研究している。低磁場では磁化による縮退が解け、動力的相関関数の磁場に垂直な方向の成分に、分離した二つの山が現われ、高磁場では鋭い山と幅の広い山が重なって現われることを示した。

第5章では横磁場を印加した場合の動的スピン相関関数について研究している。この相関関数の磁化に垂直な成分には波数が $\pi/2$ 付近に鋭い山とその高エネルギー側に磁場の強さと共に成長する緩やかな山が現われることを示した。また波数 0, π 付近では高エネルギー側に緩やかなすそをひく三角型のスペクトルが現われ、特に磁化と磁場に垂直な成分には低エネルギー側に磁場の強さと共にひろがる幅広いふくらみが現われることを示した。これらの効果は数テスラの強さの磁場で観測可能と予測されている。

第6章は結論である。

以上要するに本論文は擬一次元反強磁性体 CsCoCl₃ の磁場中における性質を、合理的なモデルを用いて解析することにより、磁化過程の実験結果を説明し、強磁場中の中性子非弾性散乱の特徴を明らかにしたもので、応用物理学の進歩に寄与するところが少なくない。

よって、本論文は博士（工学）の学位論文として合格と認める。