

氏名	鈴木 伸夫
授与学位	博士(工学)
学位授与年月日	平成10年3月25日
学位授与の根拠法規	学位規則第4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	三角格子量子反強磁性体の相転移と磁気相図
指導教官	東北大学教授 松原 史卓
論文審査委員	主査 東北大学教授 松原 史卓 東北大学教授 宮崎 照宣 東北大学教授 梶谷 剛 東北大学教授 本河 光博 東北大学助教授 佐々木 一夫

論文内容要旨

第1章 序論

相互作用が競合する系、フラストレーションが存在する系などの複雑系の秩序相と相転移の問題は近年の固体物理学上の主要な研究課題の一つである。フラストレーションが存在するスピン系では全ての場所で最低のエネルギーを持つスピン構造が存在しない。そのため、基底状態で大きな縮退が残り、多彩な性質が現れる。フラストレーションを持つ代表的なモデルとして三角格子反強磁性体がある。本章では三角格子反強磁性体の実験的、理論的研究の現状を概観した。ABX₃型六方晶反強磁性体、菱面体反強磁性体など多くのモデル物質が発見され精力的に研究されてきた。これらの研究から交換相互作用の異方性、磁場の有無、またその方向の違いなど、系の持つ対称性によりスピン構造が大きく変化することが明らかにされた。また、これらの物質の多くで温度を下げていくと逐次相転移が観測されている。このため多くの理論的研究がなされ、実験との対応が議論されている。しかし、今までの理論的研究は古典系に集中している。その理由は相転移は巨視的な現象であり、量子性は重要でなく系の次元、対称性などが重要であると考えられてきたからである。しかしながら量子系では対称性と共に量子揺らぎが相転移に影響する可能性がある。事実、古典系では説明のつかない相転移を示す物質も見つかりつつある。これら量子系の計算方法もいくつかあるが、未だに確立した方法が得られていない。

第2章 研究目的

本研究の目的は、量子スピン系を扱う実用的な方法の開発をし、三角格子反強磁性体のスピン構造と相転移について研究を行い、量子揺らぎのスピン構造に及ぼす影響を明らかにすることである。本研究では相転移の性質をスピン系の対称性に着目して考察する。スピン対称性を壊すものとして交換相互作用の異方性と外部磁場の二つを考える。前者はスピン回転対称性を壊し、後者は磁場方向のスピン反転対称性を壊す。

第 3 章 異方性効果

本章ではスピン交換相互作用の異方性 Δ と量子揺らぎが相転移に与える影響を見た。Quantum Transfer Monte Carlo 法を用いて三角格子上の $S = 1/2$ 量子反強磁性体をスピン数 $N = 24$ まで調べた。今まで、 $\Delta = 1.0$ でも相転移が起こらないという予想と、古典系と同じ範囲 $\Delta > 0$ で相転移が起こるという予想があった。本論文では、カイラリティ相が存在するのは $\Delta \geq \Delta_c (\sim 0.6)$ であることを明らかにし、新しい相図を提案した。 $0 < \Delta < \Delta_c$ の範囲でどのような相が存在するかに対しては確定的な結果は得られなかった。しかし、 $\Delta \sim \Delta_c$ で $T_c^* \sim 0.4$ という結果から KT 的な相が期待される。

古典系と量子系の差を、基底状態の量子揺らぎから検討した。古典系のカイラリティ相ではすべてのスピンの xy 面内に固定される。しかし、量子系では量子性に起因する揺らぎを生じうる。そこで、副格子磁化の z 成分の量子揺らぎを求め、スピンの xy 面内で安定であるか否かをみた。 z 成分の揺らぎは $\Delta < \Delta_c (\sim 0.6)$ でサイズとともに増大する。それに対し、 $\Delta > \Delta_c$ ではサイズ依存性は無視できるほど小さくなる。よって、 $\Delta < \Delta_c$ で量子揺らぎがカイラリティ相を破壊していると考えられる。 Δ_c は QTMC 法で求めた Δ_c とコンシステントであった。

以上の結果から古典系と量子系の違いは以下のようにまとめられる。古典系では秩序相の有無はスピンの交換相互作用の対称性にのみ依存し、対称性が破れるとすぐに秩序相が現れる。量子系ではスピンの対称性のみで相が決定するのではなく、量子揺らぎが相転移に大きく影響することがわかる。特に、対称性が高い場合に量子効果は大きく影響し、ある閾値 $\Delta_c (\sim 0.6)$ を越える異方性が存在して初めて秩序相が現れる。

第 4 章 ハイゼンベルクモデルの磁気相図

本章では磁場中のハイゼンベルク反強磁性体について調べ、磁場の相転移に与える影響について検討した。Quantum Transfer Monte Carlo 法に、部分空間コーディネイティング法を組み合わせることにより $N \leq 27$ の物理量を求めることができた。秩序パラメータは $H > H_1 (\sim 2.8J)$ において秩序相が存在することを示した。また、 $H_2 (\sim 4.2J)$ の点で比熱の振る舞いが異なっており、この違いは磁場垂直方向の短距離秩序によるものと思われる。予想される相図を図 1 に示す。この結果は次の点で古典系と大きく異なる。(1) 弱い磁場 $H < H_1$ で秩序相が現れない。(2) 磁場垂直方向の秩序が存在しない。

以上の結果から磁場効果について以下のようにまとめられる。磁場平行方向では異方性効果の場合と同様に弱い対称性の破壊は量子効果によって打ち消される。磁場垂直方向ではスピン回転対称性が壊れないため秩序が量子効果により消失する。

第 5 章 異方的モデルの磁気相図

磁場中の異方的反強磁性体について調べ、異方性効果と磁場効果の相転移に与える影響について検討した。XY モデルに縦磁場及び横磁場を印可した場合、いずれも基本的に古典系と同様の相が存在した。しかし、横

磁場中では磁場垂直方向の秩序は不安定になり破壊される。この結果は磁場垂直方向に反転対称性が存在することに起因すると思われる。イジングモデルに横磁場を印可した場合も古典系と同様の振る舞いがみられた。量子揺らぎは強い異方性が存在すれば相変化に殆ど影響を及ぼさないと考えられる。

第6章 結論

以上、対称性と量子揺らぎの相転移に与える影響を考察した。古典、量子系いずれも等方的であるハイゼンベルクモデルでは相転移は起こらない。しかし、古典系の場合弱い異方性効果あるいは磁場効果で秩序相が現れる。即ち、スピン構造は対称性にのみ依存する。ところが、量子系の場合、量子揺らぎが弱い異方性効果あるいは磁場効果を打ち消し古典秩序を壊す。量子的な基底状態は等方的な場合だけでなく、異方性が弱い場合も安定であると考えられる。その結果が相転移の消失という形で現れる。これが本研究で明らかにされた最も重要な結論である。また、以上の結果はハイゼンベルクモデルの基底状態がスピン流体相になっていることを示唆している。

本研究では Quantum Transfer Monte Carlo 法を初めて実用化した。この方法によりフラストレーションのある量子スピン系の有限温度の計算が可能になった。今まで困難であった有限温度のシミュレーションを行うことで、量子揺らぎと相転移の有無の関係を明らかにした。この方法は他の量子フラストレート系でも有効であると思われる。また、本研究では異方性、磁場効果を調べることが量子揺らぎの性質を明らかにするのに有効であることを示した。他の量子系でも弱い異方性、磁場を加えることでスピン流体相の有無が明らかになるとと思われる。

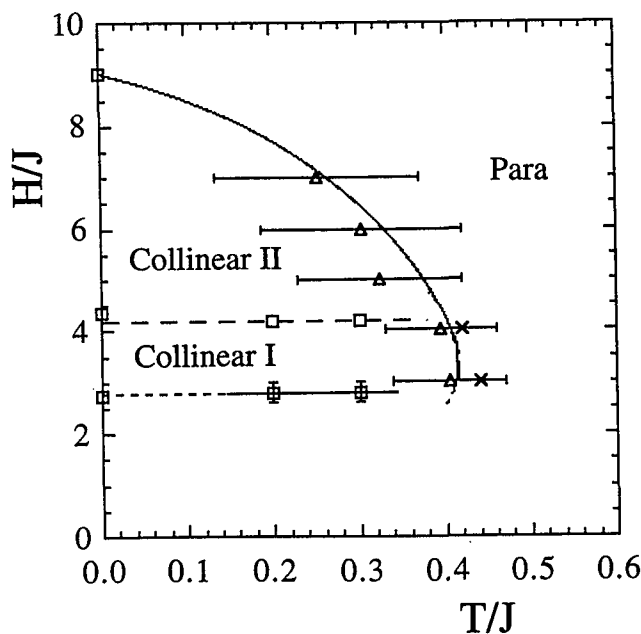


図 1

審査結果の要旨

低次元系における量子効果の解明は近年の固体物理上の主要な研究テーマの一つであると共に酸化物超伝導体等の新材料開発の上からも欠かせない。本論文は相互作用が競合する系の量子揺らぎと長距離秩序の関係を三角格子上の反強磁性体の磁気秩序を例にとり理論的に究したものであり、全編6章よりなっている。

第1章は序論であり、本研究の背景を述べている。

第2章は研究目的を述べている。

第3章はスピン交換相互作用の異方性と量子揺らぎの相転移に与える影響を解析している。著者は有限格子の面内異方性が入った反強磁性ハイゼンベルグモデルの比熱と秩序パラメータを量子転送モンテカルロ法を用いて求め、異方性定数 Δ がある閾値 Δ_c (~ 0.6)を越えると、比熱のピークが格子サイズ共に増加することを見いだした。また、カイラル秩序パラメータも $\Delta > \Delta_c$ で有限の値を持つことを明らかにした。これらの結果より、このモデルの相転移は Δ_c を越えて初めて現れる、カイラリティの秩序で特徴づけられる新しい型の相転移であると結論した。この結果は $\Delta > 0$ の全領域で相転移が起こるといふ古典系の結果と著しい対比をなす。著者は基底状態における量子揺らぎを解析し、 $\Delta < \Delta_c$ では量子揺らぎが格子サイズと共に増大し、これが古典秩序の不安定化の原因となっていると結論した。

第4章はハイゼンベルグモデルの磁気相図の研究である。著者は磁場 H を印可していくとある閾値 H_c ($\sim 2.8J$)を超えたとき初めて秩序相が現れることを明らかにした。ここでは秩序パラメータの磁場に平行な成分のみが値を持つ。これは無限小磁場の印可で秩序相が出現し、秩序パラメータの全ての成分が値を持つという古典系の結果と異なっている。様々な磁場で比熱と秩序パラメータを求めそれらの温度依存性をもとに磁気相図を提案した。

第5章は異方性を含むハイゼンベルグモデルの磁気相図の研究である。異方性が強い2つの場合(イジングモデルとXYモデル)の磁気相図を求め、これらが古典系の磁気相図と定性的に同じであることを明らかにした。

第6章は結論である。

以上要するに本論文は、低次元量子系の対称性と量子揺らぎの関係を系統的に研究し、量子揺らぎの性格が対称性によって大きく変わることを明らかにしたものであり応用物理学の発展に寄与するところが少なくない。また著者の実用化した量子転送モンテカルロ法は量子スピン系を解析する有力な方法として学会から注目を集めている。

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。