

Title	Role of Interchain Coupling in Magnetic Properties of Pseudo-One-Dimensional Quantum Spin Systems
Author(s)	古門, 聡士
Citation	
Issue Date	
Text Version	ETD
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3155502">https://doi.org/10.11501/3155502</a>
DOI	10.11501/3155502
rights	
Note	

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/repo/ouka/all/>

氏 名	吉 門 聡 士
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	第 1 4 7 5 0 号
学 位 授 与 年 月 日	平成11年3月25日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学 位 論 文 名	Role of Interchain Coupling in Magnetic Properties of Pseudo-One-Dimensional Quantum Spin Systems (擬一次元量子スピン系の磁性に及ぼす鎖間相互作用の役割)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 鈴 木 直  (副査) 教 授 天 谷 喜 一 教 授 三 宅 和 正 教 授 北 岡 良 雄

### 論 文 内 容 の 要 旨

本論文では、 $S=1/2$ 交換相互作用交替一次元量子スピン系に注目し、その磁気相転移、磁気励起、磁気共鳴に発現される特徴的な物理現象の理論的研究を行った。特に、鎖間相互作用のおよぼす効果に注目した理論を展開して、以下に示す成果を挙げた。

磁気相転移については、まず鎖内に適用する近似法として、相関を考慮したペア有効場近似 (Pair Dynamical Correlated-Effective-Field Approximation) の開発を行い、さらに鎖間相互作用を平均場で取り扱うことにより、鎖間効果を容易に議論できる方法論の確立を行った。また、一次元有限鎖系に対し厳密対角化法のプログラム開発を行うことで、鎖内の物理量をより定量的に議論すると同時に、鎖内・鎖間の交換積分についてもより定量的な評価を可能にした。なお、温度と波数 ( $q$ ) に依存した帯磁率の厳密対角化法による計算は本研究によって初めてなされたものである。

次に、磁気励起については、未だ実験、理論共に報告されていない反強磁性-強磁性交替鎖の中性子非弾性散乱強度を、厳密対角化法から得られた基底一重項状態を基とする連分数展開表式を用いて調べた。得られた強度の  $q$  依存性は、この系特有のものであり、特に励起三重項状態への遷移強度に関しては、三重項状態の分散関係を反映した振る舞いを示す。また、三重項状態より高エネルギー側の第二ギャップと連続帯領域については、実験で観測可能な領域を明快に示した。

最後に、磁気共鳴については、スピンパイエルス系  $\text{CuGeO}_3$  の一様相で観測された、超強磁場下における常磁性共鳴スペクトルの交換分裂を、平均場乱雑位相近似 (MF-RPA) を用いて解析した。得られたスペクトルは、シングルピークからダブルピークへの分裂現象だけでなく、ピーク位置と強度も、実験結果と定量的に良く一致した。さらに、MF-RPA のハミルトニアンに基づいたスピンに対する運動方程式を解くことで、ピークの起源も明らかにした。また、スピンパイエルス相で電子スピン共鳴によって観測された本来禁制遷移の基底一重項-励起三重項状態間遷移に対し、ジャロシンスキー-守谷 (D-M) 相互作用とダイマー内2つの Cu イオンに  $g$  値の相違がある場合を考慮したモデルハミルトニアンを提案することで遷移のメカニズムを解明した。なお、遷移先の三重項状態がエネルギー的に  $2\text{meV}$  と  $5\text{meV}$  の2つ存在することから、“一重項状態の海 (singlet sea)” の中を動き回る1つあるいは2つの三重項状態を基底とするモデルを提案した。得られた重要な知見は、D-M相互作用係数  $\vec{d}$  の鎖方向の成分が他のものより大きいときに実験結果が良く説明されること、また、 $5\text{meV}$  の状態は  $S=2$  を持つことである。

## 論文審査の結果の要旨

本論文では、擬一次元量子スピン系、特に交換相互作用交替スピン系、における鎖間相互作用の役割に注目した理論的研究を行い、その結果をまとめたものである。

### (1) 擬一次元交換相互作用交替スピン系に対する一般的方法論の開発

交換相互作用交替有限スピン鎖に対して厳密対角化法のプログラム開発を行い、温度と波数 ( $q$ ) に依存した帯磁率の計算を初めて行った。得られた結果を用いて鎖間相互作用を平均場で取り扱うことにより、鎖間効果による磁気秩序を議論し、現実相転移が観測されているいくつかの反強磁性-強磁性交替系の鎖間相互作用を定量的に評価することに成功した。

さらに、交換相互作用交替スピン鎖に適用する近似法として、相関を考慮したペア有功場近似の開発を行ったが、この方法は取り扱いが簡単な上に広い交替比領域で厳密対角化に近い結果を与え、また、3次元系にも容易に適用できるという利点をもつ。

また、厳密対角化法から得られた基底一重項状態とランチョス・アルゴリズムを用いて反強磁性-強磁性交替鎖の中性子非弾性散乱強度を初めて計算し、励起三重項状態への遷移強度の特徴的な  $q$  依存性、および三重項状態より高エネルギー側の第二ギャップと連続帯領域についての観測可能な領域を明らかにした。

### (2) スピンパイエルス系 $\text{CuGeO}_3$ の磁気共鳴

スピンパイエルス系  $\text{CuGeO}_3$  の一様相で観測された超強磁場下における常磁性共鳴スペクトルの交換分裂を、平均場乱雑位相近似 (MF-RPA) を用いて解析し、鎖間相互作用を評価することに成功した。さらに、スピンパイエルス相で電子スピン共鳴によって観測された2本のスペクトルに対するモデルを提案し、遷移強度の偏光依存性や磁場依存性を統一的に説明することに成功した。このモデルは、ジャロシンスキー-守谷相互作用とダイマー内2つのCuイオンに  $g$  値の相違がある場合を考慮したモデルであるが、得られた重要な知見は、低エネルギー側の遷移は  $S=1$  の状態への遷移に対応し、高エネルギー側の遷移は  $S=2$  の状態への遷移に対応することである。

以上のように本研究は、擬一次元量子スピン系の磁気相転移、磁気励起、磁気共鳴に関して示唆に富む重要な知見を得ており、物性物理学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。