The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	不純物を含む一次元量子スピン系における磁気的性質に関する理論的研究
Author(s)	森田, 幸弘
Citation	大阪大学, 1997, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/40194
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【46】

氏　　名	森　田　幸　弘（もり　た　ゆき　ひろ）
博士の専攻分野の名称	博　士（工　学）
学　位　記　番　号	第　13138　号
学位授与年月日	平成9年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科応用物理学専攻
学　位　論　文　名	**不純物を含む一次元量子スピン系における磁気的性質に関する理論的研究**
論文審査委員	（主査） 教　授　興地　斐男 教　授　石井　博昭　教　授　増原　宏　教　授　後藤　誠一 教　授　志水　隆一　教　授　岩崎　裕　教　授　河田　聡 教　授　豊田　順一　教　授　中島　信一　教　授　一岡　芳樹 教　授　樹下　行三　教　授　川上　則雄　教　授　伊東　一良 教　授　萩行　正憲　教　授　八木　厚志

論文内容の要旨

本論文は，不純物スピンを含む可積分スピン鎖の有限温度での素励起を厳密解を用いて調べ，更にスピンパイエルス転移を示す $CuGeO_3$ の磁化過程及び相関関数に対する不純物効果をモデルハミルトニアンを用いて数値的に調べたものであり，下記の5章から構成される。

第一章は序論であり，本研究の背景，必要性，及び目的について述べている。

・第二章では，一次元S＝1／2反強磁性ハイゼンベルグモデルの有限温度における素励起をベーテ仮説に基づく厳密解を用いて調べ，有限温度における素励起スペクトルの低エネルギー領域での振る舞いは絶対零度での素励起スペクトルにフェルミ分布関数をかけることで理解できることを指摘している。系の低エネルギーでの振る舞いを記述する分散曲線のP～0，P～π付近での傾きはほとんど温度に依存しないこと，P～π／2付近における励起エネルギーの最大値が温度の上昇と共に高エネルギー側へ移動することを指摘している。また，上記の温度依存性は，一次元S＝1／2反強磁性ハイゼンベルグモデルでよく記述できると考えられる現実の物質を中性子散乱を用いて精度良く測定すれば観測可能であることを指摘している。

第三章では，大きさS′の不純物スピンを一個含む可積分スピン鎖（ホストスピンの大きさS）における絶対零度及び，有限温度での素励起を厳密解を用いて調べている。絶対零度における素励起スペクトルの低エネルギー領域でのエネルギー依存性は，帯磁率などの物理量に見られる磁場依存性と同じ振る舞いを示す事を指摘している。そしてこの特徴的な振る舞いは多体効果によって生じる特徴を反映していると考えられる。有限温度における素励起スペクトルは，S＜S′のときは基底状態における残留エントロピー ln［2（S′－S）＋1］を反映して零エネルギーでの発散が見られるが，S＞S′の場合は零エネルギーにおける発散は見られず，不純物スピンを遮弊するための低エネルギー状態が増加することを反映したピーク構造のみが現れる事を指摘している。低エネルギー領域の素励起スペクトルの振る舞いは，2S＝n（n：はチャネル数）と読みかえることによりマルチチャネル近藤モデルの素励起スペクトルと一致しており，両モデルの熱力学量の振る舞いの類似性に対する説明をミクロな立場から与えている。

第四章では，スピンパイエルス転移を示す無機物 $CuGeO_3$ の絶対零度における磁化曲線を，最近接スピン間相互作用に加えて第2近接相互作用まで考慮に入れて，有限系の数値対角化により数値的に調べている。さらに，磁化曲線，スピン相関関数に対する非磁性不純物効果を有限系の数値対角化により調べている。$CuGeO_3$ の磁化曲線の計算結果は実験結果と全体的によい一致を示すが，高磁場側で3次元性（鎖間相互作用）に起因すると思われるずれが両

者の間に見られる事を指摘している。非磁性不純物を含む $CuGeO_3$ の磁化曲線の計算結果からは，不純物を含まない系と比べると外部磁場の増加に伴い低い磁場で磁化が現れ，飽和磁場に至るまでの中間磁場領域においては磁化が増加する事を明らかにしている。そしてこの事は，磁場によりスピンダイマー状態が壊された系では，不純物ドーピングによって不純物の周りにおける反強磁性的スピン間相互作用が有効的に弱まる事に起因すると指摘している。一方，スピンパイエルス転移をした系におけるスピン相関関数は，非磁性不純物の周りで増大し，これは非磁性不純物のまわりで反強磁性相関が増大することを表している。この事は，最近Znをドープした $CuGeO_3$ において実験的に観測されているスピンパイエルス転移温度以下での反強磁性相の出現のメカニズムについての考察を行っている。

第五章では本研究で得られた成果をまとめ，総括を行うと共に今後の展望について述べている。

論文審査の結果の要旨

高温超伝導体の発見を契機として量子ゆらぎ，あるいは電子相関といった概念が固体物理における興味の対象として改めて注目されてきており，それらが重要な寄与を及ぼす舞台としての低次元系に対する研究が理論，実験の両面から現在精力的に続けられている。本論文は，一次元量子スピン系における素励起の厳密解による解析，そして一次元量子スピン系と格子系とが結合した系に見られるスピンパイエルス転移に対する非磁性不純物効果を有限系の数値対角化により解析した結果をまとめたものであり，その主な成果を要約すると次の通りである。

(1) 一次元S＝1／2反強磁性ハイゼンベルグモデルの有限温度における素励起をベーテ仮説による厳密解を用いて調べ，温度上昇に伴い素励起の分散曲線のエネルギーの最大値が増加する振る舞いを示す事を指摘している。この振る舞いは Sr_2CuO_3 などの一次元S＝1／2反強磁性ハイゼンベルグモデルでよく記述される物質を中性子散乱を用いて精度良く測定すれば観測可能であることを指摘している。

(2)不純物スピンを1個含む可積分スピン鎖の素励起を厳密解を用いて調べ，絶対零度，有限温度での素励起スペクトルが，ホストスピンと不純物スピンとの大小関係により特徴的な振る舞いを示す事を明らかにしている。同様の振る舞いはマルチチャネル近藤モデルの素励起スペクトルにも見られることから，ここで得られた結果は両モデルの熱力学的性質の類似性に対するミクロな立場からの基礎付けを与えている。

(3) スピンパイエルス転移を示す $CuGeO_3$ の磁化曲線及びスピン相関関数に対する非磁性不純物効果をモデルハミルトニアンを用い有限系の数値対角化によって調べている。その結果，低磁場側で不純物を含まない系よりも磁化が現れ易く，さらに飽和磁場に至るまでの中間磁場領域においては顕著な磁化の増加が見られることを指摘している。また，スピンパイエルス転移をした系においては不純物付近でのスピン相関関数が不純物を含まない系に比べ増大する事を明らかにし，その結果に基づいて非磁性不純物をドープした $CuGeO_3$ において実験的に観測された転移温度以下での反強磁性状態とスピンパイエルス状態との共存のメカニズムに対して理論的に有用な知見を与えている。

以上のように，本論文は，不純物を含む一次元量子スピン系における多体効果をベーテ仮説も用いた厳密解，及び有限系の数値対角比などの相互作用を正確に取り扱う事ができる方法によって調べたものであり，得られた結果は理論的に重要であるだけではなく，実験結果を解析する上でも寄与するところが多いと考えられる。また，不純物効果と相互作用との相乗効果は低次元において興味深い振る舞いを引き起こすことが知られており，非磁性不純物が磁気的長距離秩序を誘起する現象は，基礎科学の観点から興味深いだけではなく，応用物理学，特に磁気材料開発に対しても有用な知見を与えると考えられる。よって，本論文は博士論文として価値あるものと認める。