The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Multiple Fluctuation of Spin and Lattice in Spin-Peierls Systems
Author(s)	大西, 弘明
Citation	大阪大学, 2002, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/43625
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

【62】

氏　　名	大西弘明（おおにしひろあき）
博士の専攻分野の名称	博　士（理　学）
学　位　記　番　号	第　16793　号
学位授与年月日	平成14年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科宇宙地球科学専攻
学　位　論　文　名	Multiple Fluctuation of Spin and Lattice in Spin-Peierls Systems （スピンパイエルス系におけるスピン・格子複合物性）
論文審査委員	（主査） 教　授　川村　光 （副査） 教　授　河原崎修三　　教　授　小川　哲生　　助教授　金道　浩一 東京大学教授　宮下　精二

論文内容の要旨

スピンパイエルス系におけるスピンと格子の複合物性は興味が持たれている。これまで理論面では、主に基底状態に関する解析が行なわれている。本学位論文では、有限温度における自発的な格子変位の発生機構とその熱力学的性質について、量子モンテカルロ法を用いて調べる。スピンパイエルス系を記述する模型としては、S=1/2一次元反強磁性ハイゼンベルグ模型と格子系の結合系を考える。

第3章では、スピン・格子状態の温度依存性を調べ、スピンパイエルス状態が低温になるにつれてどのように成長していくかを調べる。ボンド変位の分布関数や相関関数を調べることにより、高温では平均して均一な格子状態であるのが、低温になるにつれてスピンパイエルス的な揺らぎが成長してボンド交替を起こす様子を捉えた。変位は変分法で求めた基底状態での値に単調に近づくが、そのまわりの熱揺らぎが非常に大きいことが分かった。磁気的な量として帯磁率の温度依存性を調べた。スピンパイエルス的な揺らぎが顕著となる温度 T_{sp}以下で指数関数的に減少し、一方 T_{sp}より高温では、格子の熱揺らぎの効果により、格子揺らぎのない系と比較して帯磁率が大きくなることを見出した。この高温での機構を解析的に明らかにした。

第4章では、スピンパイエルス系での不純物誘起の磁性について調べる。系の磁性を担うイオンへの非磁性不純物置換に関連して、自由境界条件の下での磁気・格子構造を調べた。系の端に強いボンドが配置してそこから規則正しいボンド交替が起こり、サイト数が奇数の場合には1次元鎖の中央に生じるボンド交替の欠陥の周辺に磁気構造が誘起されることが分かった。さらに、磁性不純物の効果やボンド不純物の効果についても調べ、空間的に変化するボンド交替と不純物誘起交替磁気モーメントのミクロな構造を得た。

第5章では、通常の S=1/2のスピンパイエルス系から枠を広げて、S=1の系におけるスピンパイエルス転移について調べる。S=1/2の場合とは異なり、弾性定数 k が大きいと格子は歪まず、一様な格子状態が基底状態となることが分かった。k を変化させると、格子が歪まない一様な Haldane 状態と格子が歪んだ Dimer 状態との間で一次相転移が起こることが分かった。絶対零度では臨界値 k_cでこれらの状態が共存するが、有限温度ではエントロピー効果により Dimer 状態がより安定となることを見出した。さらに、共存状態でのスピン・格子状態についても調べ、二つの非磁性な状態間のドメイン壁での磁気・格子構造の特徴を捉えた。

論文審査の結果の要旨

大西弘明君は、量子スピンと格子の自由度がカップルした1次元系——所謂スピンパイエルス系——の諸物性を、格子自由度の揺らぎを古典レベルで取り入れた量子モンテカルロシミュレーションにより数値的に解析した。その結果、スピン量子数S=1の場合には、格子の弾性定数を変化させることにより格子が歪まないハルデーン状態と格子が歪んだダイマー状態間で1次の相転移が起きることを初めて明らかにするなど、系のスピン・格子の複合物性に新たな知見を得た。この仕事は、博士（理学）の学位論文として十分価値のあるものと認める。