



Title	量子ゆらぎが強い系での新しいスピン秩序と励起
Author(s)	宮下, 精二
Citation	大阪大学低温センターだより. 1997, 97, p. 17-22
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/5033">https://hdl.handle.net/11094/5033</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

# 量子ゆらぎが強い系での新しいスピン秩序と励起

理学研究科 宮 下 精 二 (内線5543)

E-mail: miya@ecc.sci.osaka-u.ac.jp

## 1 はじめに

スピン系の研究はこれまで主に、相互作用による協力現象の形態、その極限としての相転移現象のひな型として研究されてきた。そこでは、巨視的な秩序変数の振舞いが重要となり、量子効果は重要な役割を果たさずそのため相転移の研究では主にいわゆる“古典スピン”系が扱われて来た。そこでは、秩序を持つとする相互作用とそれを壊そうとする熱擾乱の競合、あるいは相互作用間の競合（フラストレーション）の効果に基づく諸現象が発見、研究されて来た。

それに対し、低温で重要な働きをするもう一つのタイプのゆらぎである量子ゆらぎの効果が最近特に注目を集めている。このゆらぎはスピン間の交換関係、つまり不確定性関係に基づくものであり古典スピン系に対応状態を持たない全く新しいタイプのものであり、新しい物性の担い手として期待されている。

いわゆる量子スピン効果は、古くから反強磁性体のスピンの縮みとして調べられて来た。つまり、強磁性体の秩序である磁化 $M = \sum_i S_i^z$ が多くの場合系のハミルトニアン $H$ と交換し、そのため完全強磁性状態が系の基底状態になるのに対し、反強磁性体の秩序であるスタガード磁化 $M_{sg} = \sum_i \varepsilon_i S_i^z$ （ここで $\varepsilon$ は1つの副格子で1、他で-1をとる）は系のハミルトニアンと交換しないため、完全なネール状態（ $M_{sg}$ が最大の状態）が系の基底状態になれない。このため、基底状態でのスタガード磁化の期待値 $\langle M_{sg} \rangle$ が完全なネール状態のどのくらいの割合となるかがいろいろな格子で調べられている。これまでの研究によると、1次元ではスピンの縮みは発散し基底状態でもスピンの長距離秩序が存在しないことが知られている。スピンの場合の均一系 $H = J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z + \Delta \sum_i S_i^x S_{i+1}^x$ においては、基底状態でスピン相関関数が系の異方性 $\Delta$ に依存する指数をもつべき的な緩和することがわかっている<sup>1)</sup>。それに対し、2次元系では量子ゆらぎが相当大きいものの、基底状態ではネール状態が長距離秩序を持つことがわかっている。図1にモンテカルロ法で得られた正方格子上的スタガード磁化の期待値 $\langle M_{sg}^2 \rangle$ の

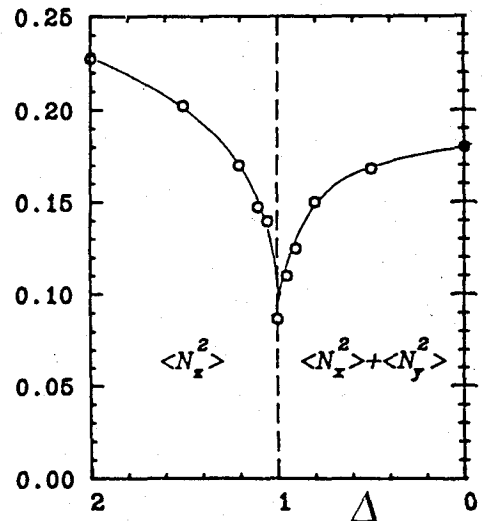


図1 基底状態の長距離相関の $\Delta$ 依存性。文献2より加筆転載

異方性依存性を示す<sup>2)</sup>。三次元系ではある程度低温でネール状態が長距離秩序を持つ。これらの結果は、古典スピン系での性質を定性的に再現するものであり本質的な量子スピン効果は現れていない。

## 2 スピンー重項の役割

このように古典的なモデルが定性的に成り立たない場合が量子無秩序状態として興味を集めてきた。反強磁性ハイゼンベルグ模型ではスピンー重項（シングレットペア）によって量子力学的に非常にエネルギーを稼げることに注目し、古典的なスピン配位よりシングレットペアをうまく配置することによってよりエネルギーの低い状態が実現できるのではないかとという考え方がP.W. Andersonによって提案された<sup>3)</sup>。これは古典的な配位にフ

ラストレーションがあり、エネルギー的に古典配位が必ずしも有利ではない三角格子反強磁性体に対して提案されRVB (Resonating Valence Bond) 状態と呼ばれた。ここでValence Bondとはシングレットペアのことである。この状態自身は必ずしも現実の状態として存在しなかったが、その考え方はその後の量子スピンの研究に大きな影響を与えてきている。

実際にシングレットペアの敷き詰めで基底状態が表される系が、フラストレート系でなく、なんと1次元の $S=1$ の反強磁性ハイゼンベルグ模型で実現されていることが発見された<sup>4)</sup>。つまり、ハルデー状態である。この系では基底状態と励起状態の間にエネルギーギャップが存在し、基底状態においてネール状態がべき的ではなく指数的に緩和することがハルデーによって指摘され、多くの数値的検証がなされた。この系を上で述べたある種のシングレットペアの敷き詰め状態と理解することが妥当であることがAffleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT)によって示された<sup>5)</sup>。その状態はVBS (Valence Bond Solid) 状態と呼ばれる。彼らは $S=1$ を2つの $S=1/2$ で表しそのどれか2つが必ずシングレットペアを組む状態が基底状態となる系を発見し、その系がハルデーの予想した性質を持つことを厳密に示した。さらに、その系を詳しく調べることでハルデー状態の更なる特徴として、隠れた秩序の存在<sup>6)</sup>や自由端において $S=1/2$ の自由度の出

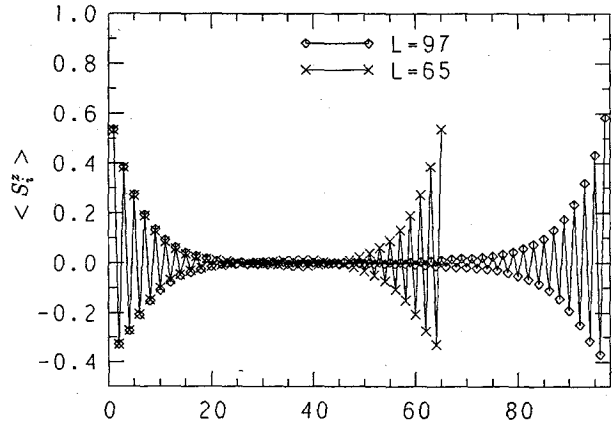


図2  $S=1$  反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態での磁化分布。文献7より加筆転載



図3  $S=1$  反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態でのVBS。文献5より加筆転載

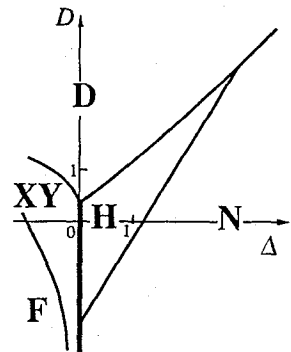


図4 拡張された $S=1$  反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態での相図。文献6より加筆転載

現等が発見された。図2に自由端をもつ $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルク模型の基底状態における磁化分布を示す<sup>7)</sup>。両端に局在した磁化構造が特徴である。

このVBSスピン状態はよく図3に示す図で表される。黒丸は $S=1$ を表す2つの $S=1/2$ であり、丸で囲んであるのはそれらが対称化されて $S=1$ となっていることを表す。また実線はシングレットペアを示す。このシングレットペアの配置の考え方に従うと、いろいろな異なる配位が考えられ、それらそれぞれが新しい基底状態として新しい相を与えることがわかる。そのため、基底状態においていろいろなパラメータに対し多様な相移転の存在が明らかになり、豊富な相図が得られて来ている。特にハルデーン相に関しては、異方性結合 $\Delta$ 、単イオン異方性 $D$ ：

$$H=J \sum_i (S_i^z S_{i+1}^z + S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) - D(S_i^z)^2$$

についてよく調べられており、図4に示す相図が得られている<sup>9)</sup>。

その他、多くのパラメータに関する相移転も明らかになって来ている。例えば相互作用の強さを互いに違いにしたいいわゆる交代ボンド系

$$H= \sum_i (1+\delta) S_i \cdot S_{i+1} + (1-\delta) S_{i+2} \cdot S_{i+3}$$

では $\delta$ が小さい間は図3の状態が安定であるが、 $\delta$ が大きくなると強いボンドでのシングレット状態が安定になる<sup>9)</sup>。同様のことは $S=2$ でも起こり、そこでは図5に示すような相が逐次的に現れる<sup>9)</sup>。

ここでみてきた1次元 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルク模型の性質が $S=1/2$ の梯子格子(図6)でも実現されることは容易に想像できる。ここで $J_2$ を強磁性にとると上で考えた図3の状態、つまりハルデーン状態が現れる<sup>10)</sup>。さらに、 $J_1=J_2$

とした場合にもやはり基底状態と励起状態の間にエネルギーギャップが生じることがわかっている<sup>11)</sup>。このように、いろいろなタイプのスピン状態がエネルギーギャップとともに存在し、それらの間で相移転があることが明かになっている。さらに、最近これらのエネルギーギャップ機構が伝導電子系において超伝導発現に重要な役割をしているとの指摘があり、詳しい研究がなされている。

このように、量子スピン系ではシングレット状態が重要な役割をする古典的には対応状態のない諸相が存在し興味深い物性の担い手となる可能性があることがわかってきた。

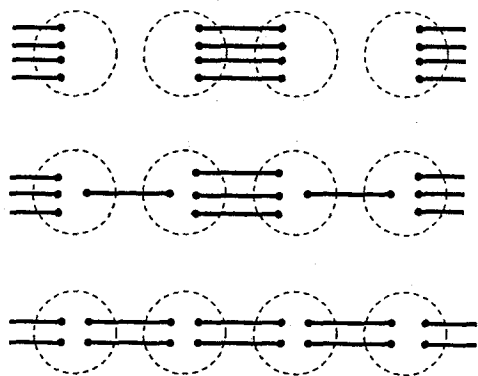


図5  $S=2$ 反強磁性ハイゼンベルグ交代ボンド模型の基底状態でのVBS。文献9より加筆転載

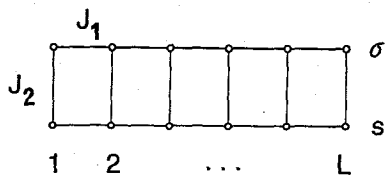


図6 梯子格子。

### 3. 古典・量子相転移

これまではシングレットペアの配位の違いによる相転移を考えて来たが、ここで古典的な配位と量子スピン系特有な配位との間の競合としての相転移を紹介しよう。

まず最初は梯子格子で $J_1$ をイジング的な異方性をもつ強磁性ボン

$$J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rightarrow J_1 \sum_i S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z \quad (\Delta > 1)$$

にとり $J_2$ を反強磁性ハイゼンベックボン

$$E(k=0) = 2(\Delta - 1)J_1$$

の異方性ギャップをもち、安定な強磁性状態の存在が明らかになる。これに、 $J_2$ の効果を入れてスピ

$$E(k=0) = 2J_1(\Delta - 1) \sqrt{1 + \frac{\gamma}{\Delta - 1}}$$

となりギャップはさらに大きくなる。ここで $\gamma = J_2/J_1$ 。これは梯子格子でのマグノンの分散関係を示している。しかし、この系では2つのマグノン間には $J_2$ を通して強い相互作用が生じ、 $J_2$ を大きくするとマグノンの凝縮がおこる。その先の状態は各 $J_2$ ボ

ンドごとのシングレットペアからなるダイマ状態である。(図7(b)) ここでのエネルギーギャップの $\gamma$ に対する依存性を図8に示す。ここで、実線は $M=0$ の空間での第一励起状態へのギャップ、破線は $M=0$ と $M=1$ の基底状態の差、その他の記号は $M=0$ の空間での第二励起状態へのギャップのサイズ依存性を示す。(◇、+、□、×、△はそれぞれ鎖長 $L=4, 6, 8, 10, 12$ のデータ)

もう一つの例はXYの異方性をもつ三角格子反強磁性体の磁化過程である。この系で $T=0$ の磁化過程を古典スピン系で調べると、まず磁場 $H=0$ の時はXY面内での $120^\circ$ 状態であり、磁場を $z$ 方向にかけるとそれが $z$ 方向に立ち上がってくるいわゆるアンブレラ構造となり、そのまま飽和強磁性状態に向かう。この間磁化曲線は全くの直線となる。これに対し、この系を表していると考えられるCsCuCl<sub>3</sub>の磁化過程において磁化ジャンプが発見され<sup>13)</sup>、その原因として、量子スピンゆらぎによるエントロピー効果(ゼロ点振動によるエネルギー利得効果)が二国・斬波によって議論され、アンブレラ型配位からある種のスピフロップ配位への相転移の可能性が議論された<sup>14)</sup>。この効果は有限温度では通常のエン

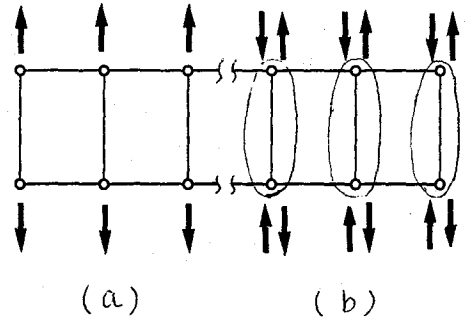


図7 強磁性鎖からなる梯子格子での基底状態 (a)  $\gamma \ll 1$ , (b)  $\gamma \gg 1$ 。

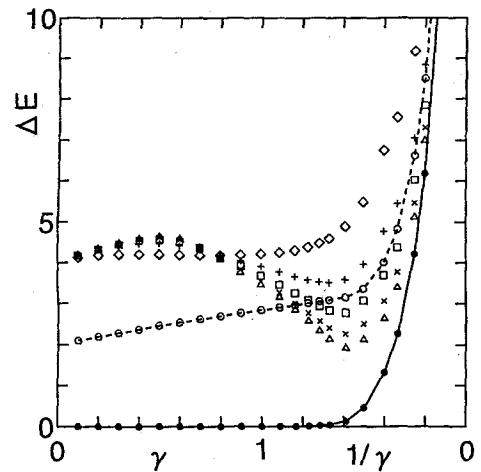


図8 強磁性鎖からなる梯子格子でのエネルギーギャップ。文献12より加筆転載

トロピー効果として現れることが確認された。また、基底状態においても有限温度での配位変化と同様な配位変化が確認され量子ゆらぎのための新しい強磁場相が出現することが明かになった<sup>15)</sup>。

図9に基底状態の異方性依存性を $\Delta = 0$ の場合の波動関数 $|G(0)\rangle$ との内積をとることで示す。ここでは $\Delta = 0.7$ で基底状態の性質が変化していることがわかる。

さらにイジング的異方性をもつ三角格子反強磁性では古典的な基底状態は $z$ 軸を含む面内のフェリ構造であるが、 $S=1/2$ の場合には基底状態は常に $M=0$ 状態にあることがわかっている<sup>16)</sup>。

$S>1/2$ の場合には異方性によって磁性・非磁性相転移が起こることが見つかり<sup>17)</sup>その相転移点近くのパラメータを持つ系の有限温度での振舞いや磁化過程に興味深い特徴の発見が期待されている。

このような量子ゆらぎが重要な役割をする状態での励起、特に集団励起には古典状態からの励起とは違う特徴が期待される。特に、量子相転移近くでの長波長のゆらぎは、古典系に対応のないゆらぎであり、その性質の解明が今後の興味深い課題であろう。

本稿は量子スピン系の理論的側面に限って話を進めてきたが、この分野での実験的研究も非常に盛んに行われ、重要な成果を納めて来ている。理論実験のより緊密な連携により、上述の諸点に関して新しい発見をなすためには、パラメータの制御可能な物質設計によって実際の物質において量子相転移の研究がなされることが期待される。

## 参考文献

- 1) A. Luther and I. Peschel: Phys. Rev **B12** (1975) 3908.  
S. Takada and K. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 1671.
- 2) S. Miyashita: in *Quantum Simulations of Condensed Matter Phenomena*, ed. by J.D. Doll and J.E. Gubernatis, (World Scientific 1990) 228.  
Y. Okabe and M. Kikuchi and S. Miyashita: 準備中.
- 3) P.W. Anderson: Mater. Res. Bull. **8** (1973) 153.  
P. Fazekas and P.W. Anderson: Philos. Mag. **30** (1974) 423.
- 4) F.D. Haldane: Phys. Rev. Lett **50** (1983) 1153, Phys. Lett. **93A** (1983) 464.
- 5) I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb and H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 799 and Commun. Math. Phys. **115** (1989) 477.
- 6) M. den Nijs and K. Rommelse: Phys. Rev. **B40** (1989) 4709.  
田崎清明: 物性研究58-2 (1992) 121.
- 7) T. Kennedy: J. Phys. Condens. Matter **2** (1990) 5737.

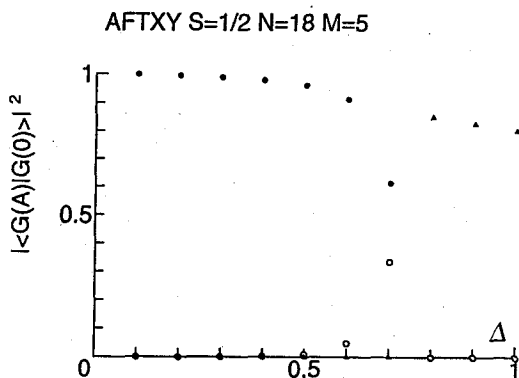


図9 三角格子反強磁性体XY的ハイゼンベルグ模型の基底状態波動関数の異方性依存性。

- S.Miyashita and S. Yamamoto: Phys. Rev. **B48** (1993) 913.
- 8) Y.kato and A. Tanaka J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 1277.  
T.Tonegawa, T.Nakano and M. Kaburagi: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3317
- 9) M.Yamanaka, M. Oshikawa and S. Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1562.
- 10) K. Hida: J. Phys. Jpn. **60** (1991) 1347.
- 11) R. N. Noack, S. R. White and D.J. Scalapino: Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 886.
- 12) M. Roji and S. Miyashita: J. Phys. Jpn. **65** (1996) 883.  
A. Kelezuk and H.-J. Mikeska: Phys. Rev. **B53** (1996) 8848.
- 13) H. Nojiri, T. Tokunaga and M. Motokawa: J. de Physique C8 Supple. (1988) 1459.
- 14) T. Nikuni and H. Shiba: J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 3268.
- 15) 準備中
- 16) H.N ishimori and S. Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 4448.
- 17) 準備中