

学 位 論 文 題 名

低次元反強磁性体における磁場効果

学位論文内容の要旨

1986年、BednortzとMüllerによって酸化物高温超伝導物質が発見された。この高温超伝導体は酸化物絶縁体の母物質に不純物をドーピングすることによって作られる。しかし、ドーピング量が少ない場合には、絶縁体であり、低温で反強磁性長距離秩序を示す。このことから、高温超伝導の発現機構が反強磁性に深く関係していると指摘されている。又、この高温超伝導体の構造解析から、キャリアーは2次元平面上に運動が制限されることがわかった。つまり、高温超伝導の発現機構を調べるためのかぎとなるのは、系が2次元系であること、量子反強磁性相互作用が現れるような強い相関のある系であること、と考えられている。

多くの研究者は、キャリアー濃度が零の極限で、 $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルのみになるモデルを採用することで超伝導相と反強磁性相の両相の存在を矛盾なく説明しようとしている。このような状況のもとで、低次元量子反強磁性体を研究することは意義深い。実際、高温超伝導体の発見によって、再び反強磁性ハイゼンベルグモデルに対する研究が活発になった。

反強磁性ハイゼンベルグモデルに対しては、MerminとWagnerによる長距離秩序の存在に関する厳密な定理がある。それによると、2次元以下の等方的な系では有限温度では長距離秩序を示さない。しかし、もし基底状態が長距離秩序をもつ状態である場合には、2次元面の面間のスピン間相互作用が少しでもあれば、面間相互作用定数程度の温度以下で長距離秩序を示すようになる。従って、2次元系での反強磁性ハイゼンベルグモデルにおいて基底状態が長距離秩序を示すかどうかを明らかにする事は重要な問題である。

外部磁場が印加されていない場合は、スピン波理論、変分モンテカルロ計算や量子モンテカルロ計算等の近年の研究によって、基底状態は長距離秩序を示すと考えられている。しかし、磁場が印加され、有限な磁化がある場合に対する研究は分子場近似による研究を除けば皆無に等しい。そこで、本論文では、磁場が印加され有限な磁化がある場合の量子反強磁性ハイゼンベルグモデルについて

基底状態がどのような長距離秩序を示すかについて調べた。本論文の方法論的な特徴は3つある。(1) 反強磁性相互作用定数をスピン成分に関して異方的にし、より一般化された反強磁性ハイゼンベルグモデルを調べた。(2) 信頼できる理論が存在しないので、様々な方法を使って結論の信頼性を高めた。(3) 2次元系だけでなく、擬1次元系も調べ、それらを統一的に理解することによって結論の信頼性を高めた。

本論文は全部で7章から構成されている。以下では、本論文の内容について簡単に述べる。

1章は序論で、本研究の意義と各章の要旨を述べる。

2章では、1次元系の基底状態について概説する。最初に、基底エネルギー、比熱、帯磁率などマクロな物理量を求めることのできる Bethe 仮説の方法について説明する。次に、スピン演算子をボソン演算子におきかえる変換を用いて、相関関数を求めることに成功した Luther と Peschel の方法について説明する。Bethe 仮説法と Luther-Peschel の方法によれば、1次元系では量子ゆらぎが大きく、磁化が0でイジング性が強い場合を除いて長距離秩序はない。

3章では、磁場が印加された反強磁性ハイゼンベルグモデルにスピン波理論を適用して、基底状態の相図を求めた。スピン波理論は基底状態が長距離秩序状態であることを仮定し、それからの励起をスピン波として扱う理論である。スピン波理論を適用して得た相図と既存の理論によるものとを比較して次の点を明らかにした。(1) 3次元系では、磁化曲線などの実験結果とあっていることから、スピン波理論はよい近似である。(2) 1次元系では、Bethe 仮説の結果と較べて、スピン波理論がよくない近似である。(3) 2次元系では、磁化が0の時にはスピン波理論はよい近似であるが、磁化が有限な時はスピン波理論がよい近似かどうか疑問が残ることがわかった。

4章では、擬1次元系について量子モンテカルロ法を用いて低温での相図を求めた。量子モンテカルロ法は Feynman の経路積分を数値的に計算する方法で、有限系、有限温度において、数値計算の範囲内で厳密に量子効果を取り込むことが可能である。擬1次元系に対する量子モンテカルロ計算においては、チェーン間のスピン相互作用の強さを変えることによって、より1次元性の強い領域から、3次元的と考えられる領域まで計算することで新しい相を発見した。(1) 1次元系で量子効果のために発生するゆらぎが、チェーン間相互作用のためスピンの x 成分、 z 成分及びそれら2つの成分が共存する長距離秩序をもつ。(2) 適当な相互作用の強さをもつ3次元的な領域では、スピン波理論を用いて3次元系で得られたのと同様なスピンの x 成分と z 成分の長距離秩序が共存する。

5章では、2次元系に対して実空間繰り込み群の手法を用いて系の秩序状態を調べた。外部磁場が零の場合に得た結果として、(1) 相互作用定数の流れ図と相関関数のサイズ依存性を調べることで、長距離秩序の存在を示した。これは他の方法を使った研究によるものと矛盾しない。外部磁場が印加され有限な磁化がある場合においても同様な計算を行い以下の結果を得た。(2) スピンの x 成分に長距離秩序がある。(3) スピンの z 成分には長距離秩序はなく、ゆらぎのみがある。

6章では、有限な磁化がある場合に基底状態を変分法で調べた。物理量を計算するときは波動関数の内積、つまり積分を計算しなければならないが、数値積分を求める1つの方法であるモンテカルロ法を用いて計算した。このモンテカルロ法は変分パラメータを含んでいるので変分モンテカルロ法と呼ばれる。試行関数を用いて計算し、エネルギーが最小となるパラメータを捜し、基底エネルギーと波動関数を求める。主な試行関数としては、Huse と Elser が提唱した遠距離までスピン相関があり、その相関が距離のべきで減衰するような試行関数と Anderson らが提唱した変分関数を採用した。変分モンテカルロ法では、試行状態を仮定するので、状態の物理的な描像が描きやすく、また、少ない計算労力で比較的大きな系を扱えるという特徴をもつ。2次元で磁化が有限な場合に対する変分モンテカルロ計算より以下の結果を得た。(1) スピンの x 方向には秩序がある。(2) スピンの z 方向にはゆらぎがあるのみである。

7章は、全体のまとめである。磁場が印加され、有限な磁化がある反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態が系の次元を、1次元系、2次元系、3次元系へ変えていったとき、どのように系の秩序状態が変化するかを種々の計算で調べた。本論文で得た新しい知見は擬1次元系と2次元系に関するものである。この結果、反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態は以下のように系の次元によって変わることを明らかにした。(1) 1次元系では、磁化が0で、イジング性が強い場合は、スピンの z 方向に長距離秩序があるが、それ以外は長距離秩序はない。(2) 2次元系では、磁化が0で、イジング性が強い場合はスピンの z 方向に、XY性が強い場合は、スピンの x 方向に長距離秩序がある。有限な磁化がある場合はスピンの x 方向にのみ長距離秩序がある。(3) 3次元系では、磁化が0の時は2次元系と同じである。有限な磁化がある時は、相互作用の強さによって、スピンの x 方向にのみ長距離秩序がある場合とスピンの x 方向と z 方向の長距離秩序が共存する場合とがある。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 徳 田 直 樹
副 査 教 授 佐久間 哲 郎
副 査 教 授 中 山 恒 義
副 査 講 師 岡 本 幸 雄

学 位 論 文 題 名

低次元反強磁性体における磁場効果

低次元磁性物質は、多様な話題を提供しながら、理学・工学の両面から研究されてきた。近年は、量子性の強い、スピンの大きさ $S = 1/2$ の低次元反強磁性体に関心を持たれている。特に、1986年に酸化物高温超伝導物質が発見されて以来、その母物質が2次元的な $S = 1/2$ 反強磁性体であることから、高温超伝導の発現機構及び強相関電子系の研究に関連して、 $S = 1/2$ 2次元反強磁性体が活発に研究されている。

本論文は、 $S = 1/2$ 低次元反強磁性体とその基底状態においてどのような長距離秩序及び相関を示すかという基本的問題を理論的に調べたものであり、実空間繰り込み群の方法、変分モンテカルロ法、量子モンテカルロ法など近年急速に発展した方法を用いて詳細に研究している。特に、磁場が印加され有限な磁化がある場合の研究はこれまで殆どなされておらず、本論文の研究は最先端を行くものと認められる。

本論文は全部で7章から構成されている。

1章では、序論として、本研究の意義と各章の要旨を述べている。

2章では、1次元反強磁性体の基底状態について概説している。主に、基底エネルギーなどのマクロな物理量を厳密に求めることのできるペーテ仮説の方法と、相関関数を求めることのできるボゾン化の方法について説明している。

3章では、磁場が印加された反強磁性体にスピン波理論を適用して、基底状態の相図を求めている。更に、スピン波理論で得た相図と既存の理論や実験で得られた相図を比較して、スピン波理論の妥当性を検討した。その結果、低次元反強磁性体については、より詳しい研究が必要であることを指摘している。

4章では、擬1次元反強磁性体に量子モンテカルロ法を適用して、低温での相図を求めている。大きな系を調べるための工夫として、チェーン間相

相互作用は平均場近似で扱い、量子モンテカルロ法はチェーン内の問題にのみ適用している。得られた成果は次の様にまとめられる。(1)量子効果のために発生する1次元系の大きなゆらぎが、弱いチェーン間相互作用によって安定化され、新しい型の長距離秩序をもつ相が現れる。(2)チェーン間相互作用が或る程度の強さをもつ場合には、3次元系と同様な相図が得られる。

5章では、2次元反強磁性体の基底状態を実空間繰り込み群の方法で調べ、次の事実を明らかにした。(1)外部磁場が零の場合の基底状態は、交換相互作用が等方的な場合を境にして、交換相互作用の異方性に応じて対称性の異なる長距離秩序を示す。(2)外部磁場が印加され有限な磁化がある場合の基底状態は、交換相互作用の異方性によらず、磁場に垂直方向のスピ成分にのみ長距離秩序を示す。

6章では、有限な磁化がある場合の2次元反強磁性体の基底状態を変分モンテカルロ法を用いて調べている。変分モンテカルロ法では、試行状態を仮定するので少ない計算労力で比較的大きな系を扱えるが、一方、どのような試行状態を仮定するかが決定的に重要である。本論文では、3章から5章までに得られた知見に基づいて、3種類の試行状態を採用した。変分モンテカルロ計算により、2次元系で磁化が有限な場合に対して得られた結果は、5章で得られた結果と定性的には同じである。

7章は、全体のまとめである。

本論文で得られた新しい知見は擬1次元系と2次元系の反強磁性体に関するものであり、以下の様にまとめられる。(1)外部磁場が零の場合の2次元反強磁性体における基底状態は、交換相互作用の異方性に応じて対称性の異なる長距離秩序を示すことを明らかにした。(2)外部磁場が印加され、有限な磁化がある場合の2次元反強磁性体における基底状態は、交換相互作用の異方性によらず同じ対称性の長距離秩序を示すことを明らかにした。(3)擬1次元反強磁性体においては、チェーン間相互作用の大きさに応じて、1次元系で出現する大きな揺らぎが安定化した新しい秩序相が現れることを明らかにした。

これを要するに、著者は、量子性の強いスピンの大きさ $S = 1/2$ の低次元反強磁性体の基底状態について多くの新知見を与えており、物性工学および応用物理学の発展に貢献するところ大なるものがある。

よって著者は、博士(工学)の学位を授与される資格あるものと認める。