

三角格子反強磁性イジング的ハイゼンベルグ模型の磁化過程

東大 理 宮下 精二
東工大 理 西森 秀稔

§1 序

三角格子反強磁性体はそのフラストレートした相互作用のために種々の興味深い秩序状態や相転移を示すことが知られてきている¹⁾。前回はイジング的ハイゼンベルグ模型の逐次の相転移と基底状態の非自明な縮退(異方的 Coupling の場合)について報告したが今回はその磁化過程について報告する。今回は特にフラストレーション系での量子効果の影響にも注目し磁化過程を古典量子の両系で調べた。反強磁性ハイゼンベルグ模型では量子効果のためスピンの縮むということがいわれるがフラストレーション系ではこの効果は更に強化され、遂にはスピンの消えてしまう、つまり静的なスピン秩序がなくなりスピンの量子液体状態が出現するのではないかという予想がアンダーソン²⁾によってなされ、その後この問題は多くの人々によって興味を持たれ研究されてきた³⁾。このようにスピンの縮みきっている状態の直接的な特徴は中性子の磁気散乱で調べることでできるが、異方的ハイゼンベルグ模型の場合には磁化過程もそれを反映すると予想される。等方的なハイゼンベルグ模型の場合には、古典系では $\vec{M} = \vec{H} / 9J$, $|\vec{H}| \leq 9J$ となり⁴⁾、また量子系でも同様に単調な過程が予想される。(§3 図6(a)) このように等方的な場合には磁化過程は特徴的な違いを示さないと考えられる。しかしながら $J^X < J^Z$ の場合には古典系では $H \rightarrow 0$ の極限で明らかな Ferri 成分、つまり一様磁化が残るが、量子系では必ずしもそうではなく両者に特徴的な違いがあるのである。こののが今回の研究の一つの動機である。ここでは§2で基底状態での磁化過程を古典系

$$\mathcal{H}_A = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{XY} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + J_{ij}^Z S_i^Z S_j^Z - 3h \sum_i S_i^Z, \quad (1)$$

及び

$$\mathcal{H}_D = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - 3d \sum_i |S_i^Z|^2 - 3h \sum_i S_i^Z \quad (2)$$

で調べる。§3で spin 1/2 の量子系、 \mathcal{H}_A の基底状態での磁化過程を調べその量子系特有の性質を議論する。

§2 基底状態での磁化過程(古典系)

最近接相互作用だけからなる場合には基底状態は3個のスピンについてだけ考えればよい。この系の配位を図1に示したように $(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ で表そう。基底状態はこの配位の中の変分で見えらる:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = 0, \quad (3)$$

$\xi = \theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$, ここで $\varphi_i = 0$ ととった。この(3)の安定解としては次の2つのタイプがある。

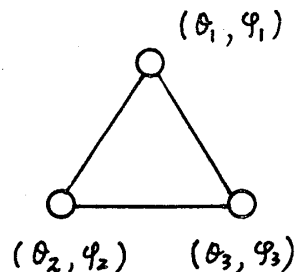


図 1

(i) 非平面解

$$\varphi_1 = 0, \quad \varphi_2 = -\varphi_3 = 2\pi/3,$$

$$\cos \theta_1 = \cos \theta_2 = \cos \theta_3 = \begin{cases} h/(2A+1) & \text{for (1)} \\ h/(3-2d) & \text{for (2)} \end{cases} \quad (3)$$

このときのエネルギー

$$E_0 = \begin{cases} -1.5(2A+1+h^2)/(2A+1) & \text{for (1)} \\ -1.5(3-2d+h^2)/(3-2d) & \text{for (2)} \end{cases} \quad (4)$$

(ii) 平面解, これら3つのベクトルがZ軸を含む平面内にあるもので $C_i = \cos \theta_i, S_i = \sin \theta_i$ $i=1, 2, 3, \theta_i = [0, 2\pi)$ とすると

$$\begin{aligned} C_i(S_j + S_k) &= A S_i(C_j + C_k) - S_i h & \text{for (1)} \quad (i, j, k) = (1, 2, 3) \\ & & \text{等} \\ C_i(S_j + S_k) &= S_i(C_j + C_k - 3d C_i - h) & \text{for (2)} \end{aligned} \quad (5)$$

を満足するものである。これらの式を解析することにより図2に与えた配位の磁場の強さに応じて理わかることがわかる。それ以外にも局所安定な与える配位はあり、また(3)の非平面解も局所安定であるが図2の配位が各磁場で最も安定であることが確かめられた。それに伴う磁場過程は図3aに与える。これは(2)のタイプのもので $d=0.1$ (破線) $d=0.3$ (実線) のものである。(1)のタイプではすべてのAにおいて連続的つまり図3の破線に類似な磁化過程を示す。こゝでの3つの特徴的な磁場の大きさを h_c^1, h_c^2, h_c^3 は各々

$$h_c^1 = 1.0 \quad \text{for (1)}, \quad h_c^1 = 1 - 2d \quad \text{for (2)}$$

$$h_c^2 = \begin{cases} \{2A - 1 + \sqrt{2A^2 + 4A - 7}\} / 2 \\ \{1 + \sqrt{1 + 4(4d^2 + 6d)}\} / 2 \end{cases} \quad (6)$$

$$h_c^3 = 3.0 \quad \text{for (1)}, \quad h_c^3 = 3 - 2d \quad \text{for (2)}$$

となる。

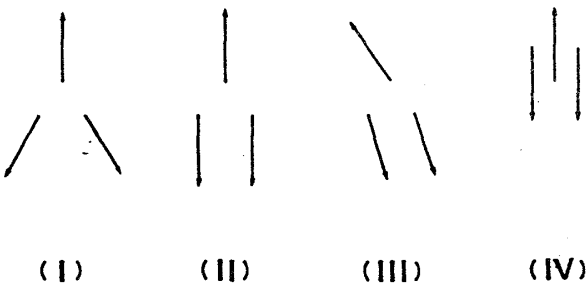


図 2

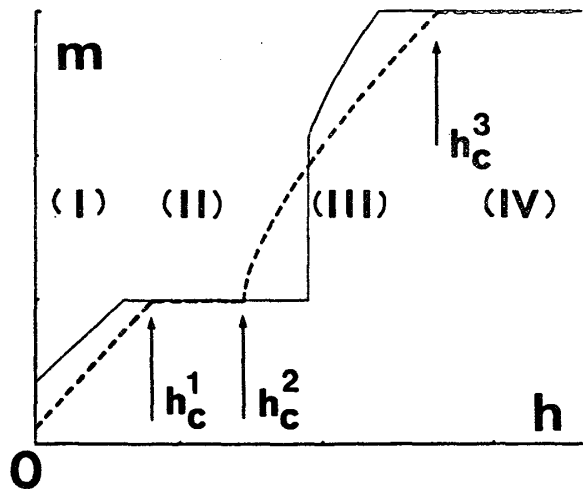


図 3

(6)における h_c^2 の評価は変化が連続的な場合のもので $d = 0.3$ の時のように不連続な場合には式(5)を数値的に調べることで求められる。また領域(I)での変化は(1), (2)で各々

$$M^z = \frac{A-1}{1+A} + \frac{2h}{1+A} \quad \text{及び} \quad M^z = \frac{D}{1-D} + \frac{h}{1-D} \quad (7)$$

となる。図4a, bに(1), (2)の基底状態での相図 (h, A) 及び (h, d) を与える。図4bの破線は不連続転移の場所を示している。

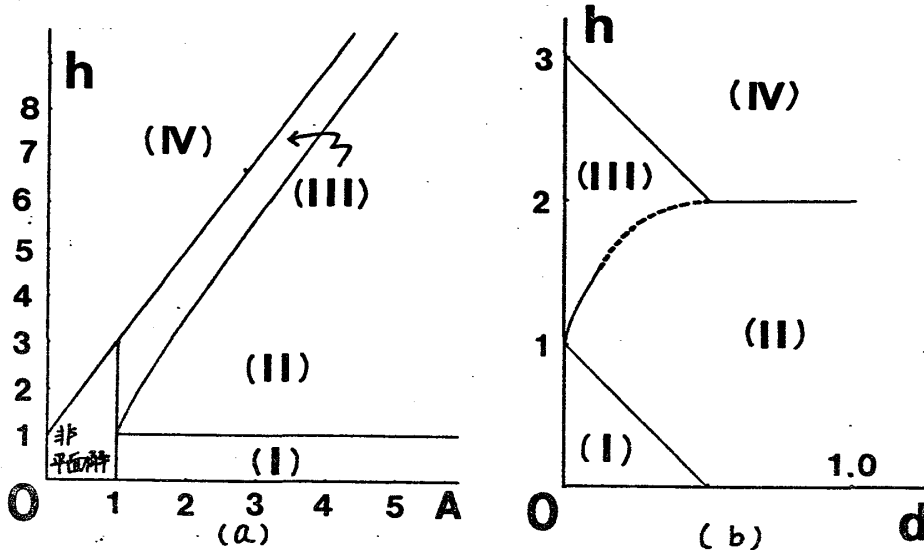


図4

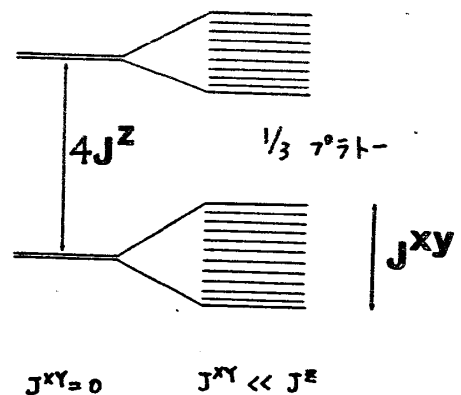
また(III)の配位では $M^z = \sum_{i=1}^3 S_i^z$ のみならず $M^x = \sum_{i=1}^3 S_i^x$ も有限の大きさを持ち、これは等方的な場合 ($A = 1.0$ or $d = 0.0$) には見られなかった磁場中での非自明な自由度を与えることも注意しておきたい。

§3 基底状態での磁化過程 (量子系)

量子系の磁化過程に関しては擾動論的な考えから次のような振舞が予想される。今、 $J^{xy} = 0$ とすると Ising 模型となり、どの3角形をすべてのスピンのそろわないという条件を満たすマクロに輪廻した状態 (Wannier state) が基底状態になる。そして第一励起状態とのエネルギー差は $4J^z$ である。今 $J^{xy} \ll 1$ を擾動として考えるとスピン成分の相互作用は J^{xy} の一次から寄与するので Wannier state

は $\sigma = \sigma' - J^{xy}$ のバンドにスプリットする。(図5) しかしながらそこで新しい基底状態は多くの状態の線型結合であり完全な ferrimagnetic 状態 (図2 (II)) ではないと予想される。そして適当な考察から

$\lim_{H \rightarrow 0} M_z(H) = 0$ が予想される。また $J^z > H > J^{xy}$ のある範囲で完全な ferrimagnetic 状態あるいはそれに近い状態が最小エネルギーを与え、そこで $1/3$ プラトーが磁化過程に出現することが予想できる。今、系(1)では M^z と \mathcal{H}_A と交換するので状態のエネルギーは



$H=0$ のエネルギー E_0 , $\langle \Psi | \mathcal{H}_A | \Psi \rangle = E_0$, を用いて $E(H) = E_0 - H M^z$, $M^z = \langle \Psi | M^z | \Psi \rangle$ となるので M^z によって分類された固有空間での基底エネルギー $E_0(M^z)$ の情報から磁化過程が決定できる。上述の予想を実際にエネルギースペクトル $E_0(M^z)$ を調べることで確かめたわけであるが量子系では古典系の場合のように3個のスピンを切り出して考えれば全系のハミルトニアンを対角化しなくてはならない。これは一般的にはできないので有限の系を数値的に対角化することによってその振舞いを予想する。図6に磁化過程の例を示す。ここではスピンの数が有限なので階段的な形になる。ここで見られるように量子系でも1/3プラトーは存在するがこれまでの磁化過程は古典的な場合と異なり0から初まり直線的なものでありFermi磁性的特徴を持たないことを示唆しているようだ。これが1の量子効果の特徴である。また波動関数の解析から次の特徴も見つかった。 S^z を対角化する表示で波動関数を各々の M^z について書くと

$$|M^z\rangle = \sum_j c_j |i\rangle \quad \text{with } |i\rangle = |++\dots\rangle \text{ 等} \\ (\sum_j S_j^z = M^z)$$

となるが、今、状態がどれだけ量子的な状態かを示す目安として次の量を考える

$$Q = \sum_j c_j^4 \times (\sum_j 1) \quad , \quad \sum_j c_j^2 = 1. \quad (8)$$

ここで Q は $M^z = \sum_j S_j^z$ である基底ベクトルで $\sum_j 1$ はその数である。ここで $1 \leq Q \leq (\sum_j 1)$ であり $Q \leq (\sum_j 1)$ のときは少数の $|j\rangle$ での状態が表わす古典的な状態と考えられ、また $Q \leq 1$ のときは位相空間内に非常に広がった量子的な状態と見なせるだろう。(但し、 Q は基底の取り方に依るのであくまで目安である) 図7に $Q(M^z)$ を示す。ここでわかるように1/3プラトータを与える状態は非常に古典的であるが、他の場合は、1の前後とき量子的混合状態であると考える。

また別の解析により sublattice 秩序も1/3プラトータのみ大きくなりその他の小さな値をとる傾向があることがわかった。このような性質は古典系の場合 (sublattice 構造は常に完全) に見られない興味深い性質であり磁場中の中性子散乱などで実際には調べられる量子効果の一つとなると考えられる。

参考文献

- 1) S. Miyashita & H. Kawamura: J. P. S. J. 54 (1985) 3385 及びその文献
- 2) P. W. Anderson: Mater. Res. Bull. 8 (1973) 153, P. Fazekas and P. W. A.: Phys. Mag. 30 (1974) 423
- 3) 鈴木増雄, 宮下精二, 高須晶子: 数理科学 268 (1985) 70 及びその文献
- 4) K. Hirakawa and H. Kadowaki: Proceeding of International Conference of Neutron Scattering (1985) ^{Santa Fe}
- 4) H. Kawamura & S. Miyashita: J. P. S. J. 54 (1985) No. 12

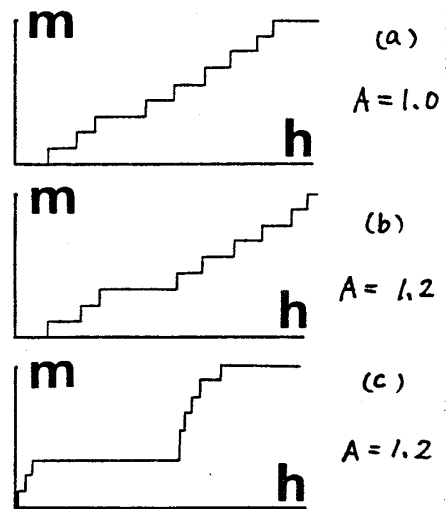


図6 (格子は3x6, 周期境界)

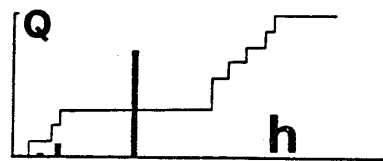


図7 (図6(b)と同じ)