

格子の不均一さによる磁気構造の出現

阪大院 理学研究科 西野正理¹, Pascal Roos, 大西 弘明², 宮下精二³

一次元の反強磁性鎖では強い量子ゆらぎのため絶対ゼロ度においても均一系においては磁化が出現しない。しかし、これらの系に何らかの不均一性を導入すると、磁気構造が誘起される。一次元鎖に non magnetic なサイトを混入すると open boundary 系の問題に帰着するが、 $S = 1/2$ では静的な構造因子や局所帯磁率が解析的にあるいは数値的に求められている [1, 2]。また、ランダムな exchange coupling を持つ鎖の性質についても調べられている [3, 4, 5]。そして $S = 1$ のハイゼンベルグ系では、特に端の効果は有名である [6, 7]。

本研究の目的は、格子の空間構造を反映した強い量子ゆらぎによる様々な量子スピン効果を明らかにすることである。そのため、いろいろな格子での磁気秩序における量子効果を、量子モンテカルロ法、対角化法などで調べた。今回、我々は $S = 1/2$ の uniform なハイゼンベルグ鎖とボンド交替鎖で一部の相互作用の大きさを変えた系、および $S = 1$ のハイゼンベルグ鎖に $S = 1/2$ のスピンを混入した系において現れる不均一性誘起磁気構造の性質、特に、その温度依存性を明らかにした。

1 $S=1/2$ ハイゼンベルグ鎖における bond impurity

1.1 uniform 系での impurity 効果

はじめに、 $S=1/2$ の 61 サイトの open boundary 系で、真ん中だけ強さの異なるボンドをいれたモデルを考える。図 1(太いボンドが他の 2 倍の強さ) に中心部分のボンドを強くした基底状態の磁気構造を示す。ここで基底状態での磁気構造を求めるときに、loop algorithm による量子モンテカルロ法で M_z を固定する方法を考え(この場合、基底状態はダブルレットなので $M_z=1/2$ のスペース)、十分低温 ($T=0.01$) でシミュレーションを行った。この図から、強いボンドの左側に磁化が固まっていることが分かる。この理由はサイトの偶奇性によって理解できる。つまり、強いボンドによりここには強い singlet 構造ができ、この両側で相関が非序に弱くなり、chain が切れたようになり、二つの domain に分けられ、Lieb の定理により偶数サイトのほうは singlet の基底状態、奇数サイトのほうは doublet の基底状態が実現していると考えられる。弱いボンドを入れた場合には、この弱いボンドのところで、切れたようになるので、今度は左右の偶奇性が反対になり、磁気構造も逆になる。

¹ E-mail: nishino@chem.sci.osaka-u.ac.jp

² E-mail: onishi@spin.ess.sci.osaka-u.ac.jp

³ E-mail: miya@temp.ess.sci.osaka-u.ac.jp

次に、左右のドメイン内の相関を見と、左端と右端から測った2点相関関数や両ドメインの真ん中からの2点相関関数の結果から、同様に左右の domain 内で強い相関がある事が分かる。つまり磁気構造は異なるが、どちらの領域でも強い相関を持っている。平均的には磁気構造が消失している領域でもスピンは強い相関を保ちつつ、時間的に揺動していることがわかった。左右のドメインの相対運動を調べることは今後の課題である。

1.2 ボンド交替系における impurity 効果

ここでも奇数の open chain で以下のような場合を考える。真ん中一カ所でボンドが強い強いとなっていて、両端は強いボンドで終わっている場合を (a) とする。(b) は (a) と真ん中は同じだが、両端は弱いボンドで終わる場合。(c) は反対に真ん中一カ所でボンドが弱い弱いとなっていて、両端が弱いボンドで終わる場合。(d) は (c) と真ん中は同じだが、両端が強いボンドで終わっている場合。(a) のモデルでは基底状態で真ん中の bond impurity を中心として、その付近で M_z が $1/2$ に相当する磁気構造が誘起される (図 2)。これは、ボンド交替している部分で強いボンドのところ singlet pair を作っていくと、真ん中の強いボンドが隣り合っているところだけがあり、此処に M_z が $1/2$ に相当する磁化が誘起されると考えられる。(d) のモデルでも同様の結果が得られる。(c), (d) のモデルでは $T=0.01$ で3等分された3つの磁気構造が誘起されるが、これから、次のような結論が導かれる。ボンド交替系にボンドの impurity が入った場合、singlet pair を作っていったときに余ったサイトやボンドのところ、local に磁化が誘起され、ボンド交替が比較的強い場合、その local structure は一つのスピンのように見なすことができ、そしてそれが独立に動いていると言う描像があてはまる。

2 $S=1$ ハイゼンベルグ鎖における site impurity

$S=1$ で64サイトの周期的な chain に2つの $S=1/2$ の impurity を輪の中で対局に入れたモデルを考える。 $T=0.01$ で total $M_z=1$ の空間での各サイトの磁化を調べると、impurity により induce された磁化が impurity を中心に比較的広範囲に広がっていることが分かる [8]。この磁気構造の様子は pure な $S=1$ の open boundary condition の場合の edge 効果と似ていて [6, 7]、この場合も、local に誘起された磁化の相互作用により、基底状態は triplet であり、そのすぐ上に singlet の励起状態があると考えられる。この低エネルギーでの total M_z にたいする状態の分布を求めることにより、エネルギーギャップを見積もると、 $0.0047J \pm 0.0002J$ という非常に小さな値となった。さらに、有限温度での impurity site からの2点相関関数を求めた結果、impurity のまわりの local structure とおしの相関は基底状態ではしっかりしているけれども、少しでも温度を上げると壊れやすいということが分かった。つまり、低エネルギーでのエネルギー準位の擬縮退により、その構造は非常に低い温度で消失する。

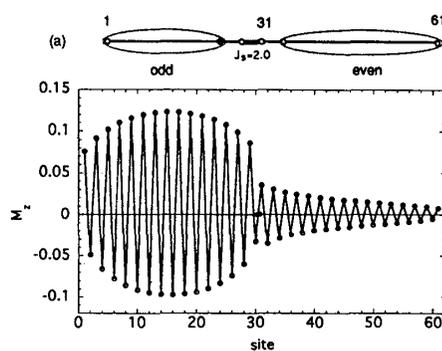


図 1: 強い bond impurity を真ん中にいれた $S=1/2$ 、61 サイト open 系の磁気構造。

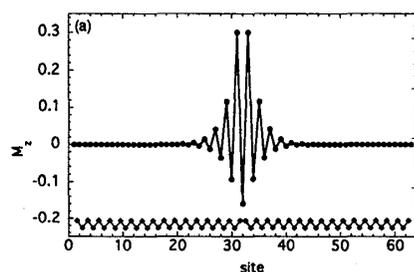


図 2: bond impurity を含むボンド交替系モデル (a) の磁気構造。diamond はボンドの強弱を示す。

参考文献

- [1] S. Eggert and I. Affleck, Phys. Rev. B **46**, 10866 (1992).
- [2] S. Eggert and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **75**, 934 (1995).
- [3] D. S. Fisher, Phys. Rev. B **50**, 3799 (1994).
- [4] A. Furusaki, M. Sigrist, P. A. Lee, K. Tanaka and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **73**, 2622 (1994).
- [5] A. Furusaki, M. Sigrist, E. Westerberg, P. A. Lee, K. B. Tanaka and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **52**, 15930 (1995).
- [6] T. Kennedy, J. Phys. Condens. Matter **2**, 5737 (1990).
- [7] S. Miyashita and S. Yamamoto, Phys. Rev. **B48**, 913 (1993).
- [8] P. Roos and S. Miyashita, Phys. Rev. B, in press. cond-mat/9812397.