

フェリ磁性混合スピン鎖の量子物性

岡山大学理学部 山本昌司

反強磁性的相互作用をもつ量子交替スピン鎖

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^N (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{s}_j + \mathbf{s}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}) \quad (J > 0), \quad (1)$$

を考える. $\mathbf{S}_j, \mathbf{s}_j$ はそれぞれ, j 番目のユニット・セルに属する大きさ S, s ($S > s$) のスピン演算子である. ハミルトニアン (1) の基底状態がスピン $(S-s)N$ をもつ多重項であることは, Lieb-Mattis の定理 [1] が直ちに教えてくれる. さらにこの系にスピン波理論 [2,3] を適用すると, 格子定数を a として, 2つの分散

$$\omega_k^{\mp} = \sqrt{(S-s)^2 + 4Ss \sin^2(ak)} \mp (S-s), \quad (2)$$

が得られる. それぞれのモードは, 基底状態磁化を減少/増加させるという意味で, 強磁性的/反強磁性的性格を帯びている. 実際, $k \rightarrow 0$ での振る舞いを見てみると, 強磁性モードでは分散が k^2 に比例し, 反強磁性モードでは励起ギャップが存在し Haldane 磁性体を想わせる.

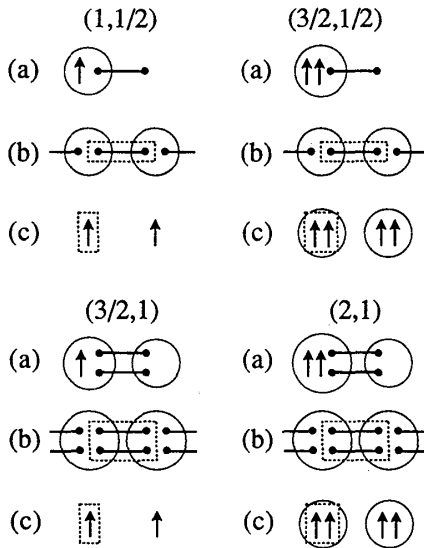


FIG. 1. 独立ダイマー極限におけるスピン- (S, s) フェリ磁性鎖の $M = (S-s)N$ の基底状態 (a), スピン- $(2s)$ 反強磁性鎖の AKLT 基底状態 (b), スピン- $(S-s)$ 強磁性鎖の $M = 2(S-s)N$ の基底状態 (c). 関係式 (a) $\approx [(b) + (c)]/2$ が期待される.

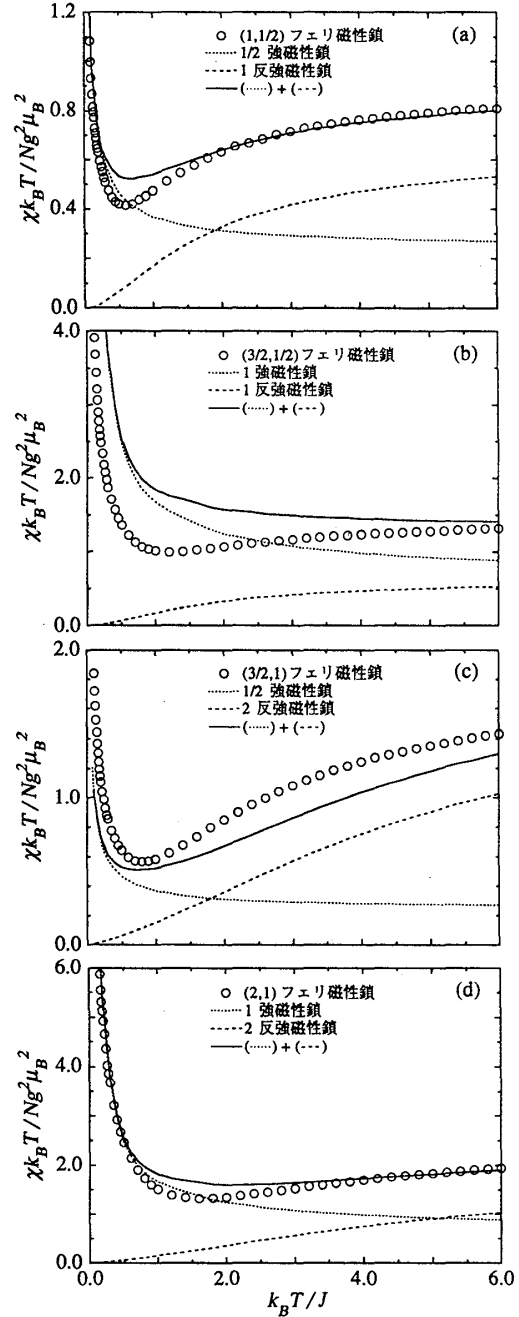


FIG. 2. スピン- (S, s) Heisenberg フェリ磁性鎖の帯磁率 (○). 点線/破線は, スピン- $(S-s)$ Heisenberg 強磁性鎖/スピン- $(2s)$ Heisenberg 反強磁性鎖の帯磁率. いずれも量子モンテカルロ計算. ユニット・セル数 N は, 混合スピン鎖ではスピン数の半分, 単一スピン鎖ではスピン数そのものであることに注意.

さてこのように、フェリ磁性は強磁性・反強磁性の両側面を併せ持つのであるが、そこには何か定量的クライテリオンは無いのだろうか。この議論のきっかけとしたいのが、第1図に示したアイデアである。ここでは、フェリ磁性混合スピン鎖を独立ダイマー極限の基底状態で、反強磁性整数スピン鎖を AKLT の VBS 状態で、それぞれ象徴的に捕らえようとしている。この素朴な図式に基づけば、スピン- (S, s) フェリ磁性は、スピン- $(2s)$ 反強磁性とスピン- $(S-s)$ 強磁性の融合ではないかと考えたくなる。この着想のもとに、第2図にさまざまな (S, s) に対する帯磁率を示す。いずれの場合も χT は極小をもち、強磁性と反強磁性の交錯がフェリ磁性鎖に普遍的な現象であることがわかる。しかし第1図に示した和則の成否は、構成スピンに依存していることがわかる。(a), (d) では、強磁性的振る舞いから反強磁性的振る舞いに移り変わる過渡的な温度領域を除いて、和則

$$\chi^{(S,s)\text{-ferri.}} = \chi^{(S-s)\text{-ferro.}} + \chi^{(2s)\text{-antiferro.}}, \quad (3)$$

が見事に成立している。しかし (b), (c) ではこの限りではない。第1図を眺めているだけではわからなかった、 $S = 2s$ というクライテリオン [4] が見えてくる。

$S = 2s$ の場合が特別であるということは、いくつかの解析計算の中にも見え隠れしている。まず、高温帯磁率の常磁性的振る舞いは $S = 2s$ の場合を区別する。高温極限の帯磁率は

$$\frac{k_B T \chi^{(S,s)\text{-ferri.}}}{Ng^2 \mu_B^2} = \frac{1}{3} [S(S+1) + s(s+1)], \quad (4)$$

$$\frac{k_B T \chi^{(S-s)\text{-ferro.}}}{Ng^2 \mu_B^2} = \frac{1}{3} (S-s)(S-s+1), \quad (5)$$

$$\frac{k_B T \chi^{(2s)\text{-antiferro.}}}{Ng^2 \mu_B^2} = \frac{1}{3} 2s(2s+1), \quad (6)$$

と与えられるが、ここで $S = 2s$ の場合に限って、等式 $\chi^{(S,s)\text{-ferri.}} = \chi^{(S-s)\text{-ferro.}} + \chi^{(2s)\text{-antiferro.}}$ が成り立つ。次に、強磁性的素励起は低温熱力学を支配すると考えられるので、分散 (2) の強磁性モードに注目しよう。スピン- s Heisenberg 強磁性鎖のスピン波励起の分散は、 $\omega_k = 2Js[1 - \cos(ka)]$ と与えられたことを思い起こすと、低波数分散の曲率

$$v^{(S,s)\text{-ferri.}} = \frac{Ss}{2(S-s)} J, \quad v^{(S-s)\text{-ferro.}} = (S-s)J, \quad (7)$$

が得られる。両式は $S = 2s$ の場合に限って一致するのである。さらに、修正スピン波理論による低温熱力学 [5],

$$\begin{aligned} \frac{C}{Nk_B} &= \frac{3}{4} \left(\frac{S-s}{Ss} \right)^{1/2} \frac{\zeta(\frac{3}{2})}{\sqrt{2\pi}} t^{1/2} - \frac{1}{Ss} t \\ &\quad + \frac{15}{32(S-s)^{1/2}(Ss)^{3/2}} \left[\frac{(S^2 + Ss + s^2)\zeta(\frac{5}{2})}{\sqrt{2\pi}} - \frac{4\zeta(\frac{1}{2})}{\sqrt{2\pi}} \right] t^{3/2} + O(t^2), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\chi J}{N(g\mu_B)^2} &= \frac{Ss(S-s)^2}{3} t^{-2} - (Ss)^{1/2}(S-s)^{3/2} \frac{\zeta(\frac{1}{2})}{\sqrt{2\pi}} t^{-3/2} \\ &\quad + (S-s) \left[\frac{\zeta(\frac{1}{2})}{\sqrt{2\pi}} \right]^2 t^{-1} + O(t^{-1/2}), \end{aligned} \quad (9)$$

もまた示唆的である。これをスピン- s Heisenberg 強磁性鎖の結果 [6],

$$\frac{C}{Nk_B} = \frac{3}{8s^{1/2}} \frac{\zeta(\frac{3}{2})}{\sqrt{\pi}} t^{1/2} - \frac{1}{2s^2} t + \frac{15}{32s^{7/2}} \left[\frac{s^2 \zeta(\frac{5}{2})}{4\sqrt{\pi}} - \frac{\zeta(\frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}} \right] t^{3/2} + O(t^{5/2}), \quad (10)$$

$$\frac{\chi J}{N(g\mu_B)^2} = \frac{2s^4}{3} t^{-2} - s^{5/2} \frac{\zeta(\frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}} t^{-3/2} + \frac{s}{2} \left[\frac{\zeta(\frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}} \right]^2 t^{-1} + O(t^{-1/2}), \quad (11)$$

と比べてみると、驚いたことに、 $S = 2s$ の場合に限り、比熱で第2項まで、帯磁率で第3項までがぴたりと一致するのである。ここで挙げた第2, 第3の論拠は、最低次のスピン波理論の範囲内で成立することであり、その意味で注意は必要である。しかし第2図を見る限り、 $S = 2s$ が特別な場合であることは確信してよさそうである。 $S \neq 2s$ の場合には、分解則を変えてみてもこうした和則は得られない。 $\chi^{(S-s)\text{-ferro.}} + \chi^{(2s)\text{-antiferro.}}$ を強磁性・反強磁性が均衡して調和の取れた帯磁率とすれば、 $(S, s) = (3/2, 1/2)$ では、 χT の極小が低温側にずれて発散がより急激に起こり、 $(S, s) = (3/2, 1)$ では、 χT の極小が高温側にずれてより急激な中温域の増加が演出される。 $S > 2s$ では強磁性的フェリ磁性、 $S < 2s$ では反強磁性的フェリ磁性が得られるというわけである。 $S = 2s$ のフェリ磁性は、強磁性・反強磁性が見事に均衡した美しい融合磁性なのである。

-
- [1] E. Lieb and D. Mattis: J. Math. Phys. **3** (1962) 749.
 - [2] S. K. Pati, S. Ramasesha and D. Sen: Phys. Rev. B **55** (1997) 8894.
 - [3] S. Brehmer, H.-J. Mikeska and S. Yamamoto: J. Phys.: Condens. Matter **9** (1997) 3921.
 - [4] S. Yamamoto: Phys. Rev. B **59** (1999) 1024.
 - [5] S. Yamamoto and T. Fukui: Phys. Rev. B **57** (1998) 14008.
 - [6] M. Takahashi: Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 168.