

乱れたスピンプाइエルス系における一次転移の理論的可能性

東京大学 理学部 齋藤 雅子¹

1993 年の無機スピンプाइエルス (SP) 系 CuGeO_3 の発見 [1] 以来、スピンプाइエルス系に関する実験、理論両面からの研究が精力的に行われてきた。特に、この物質では不純物置換が可能であることから、不純物効果の研究が進んだ [2]。1995 年には、Ge サイトに Si をわずか 0.7% 置換した系で、SP 格子歪みと反強磁性の両長距離秩序に起因する Bragg spot 強度が低温で共存するという実験結果が報告された [3]。我々は位相ハミルトニアンを用いて解析を行い、乱れた SP 系では反強磁性長距離秩序が出現し、格子歪みの長距離秩序と共存する可能性のあることを示した [4]。この共存状態では、不純物付近で、格子歪みは抑制され、反強磁性秩序パラメーターが大きくなる。この後、この共存状態は、 CuGeO_3 の不純物置換系で一般的に存在するものであること、相分離ではないこと、理論から予測されたように秩序パラメーターの大きさは空間変化すること、等が実験から示された。また、共存状態の不純物濃度依存性については、ある臨界濃度で格子歪みは消失し、ネール状態に近い状態に転移することが、今までに、実験 [5, 6] 及び理論 [8] から示されている。特に、Mg 置換した CuGeO_3 系では詳しい実験が行われ、この転移は不純物濃度の関数として一次転移であることが分かっている [6, 7]。

今回はこの一次転移に着目し、鎖間相互作用を平均場で取り入れて不純物効果を議論した [9]。計算は以下の位相ハミルトニアンを用いて、絶対零度で行った。

$$\mathcal{H} = \int dx \left[A(\nabla\theta(x))^2 + Cp(x)^2 - J\lambda \frac{u(x)}{a^2} \sin\theta(x) - D \cos 2\theta(x) + \frac{2K}{a} u(x)^2 - F \cos\theta(x) + \frac{F}{2} \langle \cos\theta \rangle \right],$$

ここで、 $A = Ja/8$, $C = \pi^2 Ja/2$, $D = \pi^2 J/8a$, $F = 2J_\perp \langle \cos\theta(x) \rangle / a$ であり、 λ : スピン格子相互作用、 J : 最近接相互作用、 $J_\perp$: 鎖間相互作用、 $u(x)$: 格子歪みの大きさ、 K : 弾性パラメーター、 a : 格子間隔である。無次元化したスピン格子相互作用 $\eta = J\lambda^2/4\pi^2 Ka^2$ 、鎖間相互作用 $j' = 2J_\perp/\pi^2 J$ をパラメーターとした相図は不純物が無い場合には既に稲垣らにより得られており、 $\eta/j' > \sqrt{3}$ では SP 相、 $\eta/j' < \sqrt{3}$ ではネール相で、それらが一次転移で隣り合う形になっている [10](図 1 (a))。今回はこの相図上で不純物効果を考え、SP 状態、ネール状態及び共存状態のエネルギーを比較して基底状態を求めた。いわば、稲垣らの相図に新たに不純物濃度の軸を付け加えることになる。

SP 系 ($\eta/j' > \sqrt{3}$) では、不純物濃度が有限になった途端に共存状態が安定化し、さらに不純物濃度を上げていくとあるところでネール状態に転移する。共存状態、ネール状態のエネルギーを比較して、この転移の次数を評価すると、鎖間相互作用が比較的大きい系 ($\sqrt{3} < \eta/j' < 2$) では、はっきりした一次転移が起こることが分かった (図 1 (b))。この結果は不純物効果の強さにも依存せず、一般的に成り立つ。 CuGeO_3 に対してパラメーターの値を評価すると、 $\eta/j' \sim 1.8$

¹E-mail: saito@watson.phys.s.u-tokyo.ac.jp

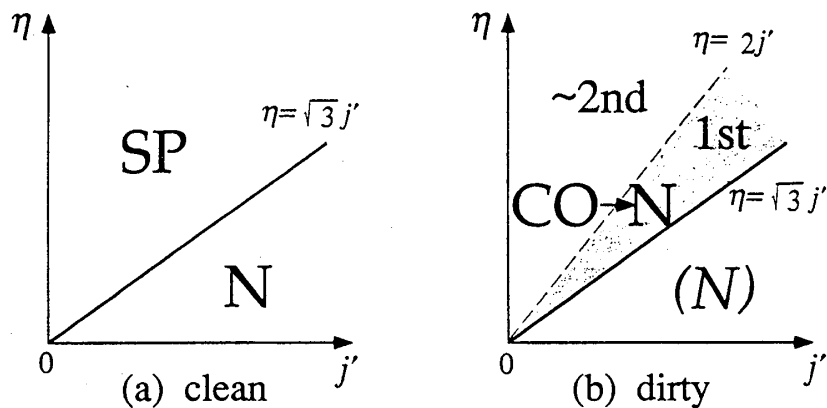


図 1: (a) 純粋な系、(b) 乱れた系の $\eta-j'$ 相図。SP、CO、N はそれぞれ、スピンプイエルス相、共存相、ネール相を示し、~2nd、1st は、その領域での相転移がほとんど二次転移的であるか、はっきりした一次転移となるかを表わす。

となり、系は図 1 (b) の相図の一次転移の領域にある。今回の計算では平均場近似を用いているので、一次転移と二次転移の境界等、結果の定量性は信用できないが、「CuGeO₃ の Mg 置換系で見られた一次転移は、CuGeO₃ 自身の大きな鎖間相互作用によるもの」と説明できると考えている。この理論結果からは、CuGeO₃ を別の不純物で置換した系でも、同様な一次転移が期待されることになる。

参考文献

- [1] M. Hase, I. Terasaki and K. Uchinokura: Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 3651.
- [2] Effects of impurities in CuGeO₃ is first reported in M. Hase *et al.*: Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 4059.
- [3] L. P. Regnault *et al.*: Europhys. Lett. **32** (1995) 579.
- [4] H. Fukuyama, T. Tanimoto and M. Saito: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1182.
- [5] S. Katano *et al.*: Phys. Rev. B **57** (1998) 10280.
- [6] T. Masuda *et al.*: Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 4566.
- [7] H. Nakao *et al.*: submitted to Phys. Rev. B.
- [8] M. Saito: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 2477.
- [9] M. Saito: submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
- [10] S. Inagaki and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 3620.