

混合スピン系の量子相転移

大阪大学大学院工学研究科 応用物理学専攻 川上則雄

近年、スピンの大きさが混じった「混合量子スピン系」の研究が精力的に行われている。実験的には、今のところフェリ磁性の基底状態を持つ物質が発見されているのみであるが[1]、理論的にはフェリ磁性のものだけでなく[2, 3]一重項基底状態をもつ系も系統的に研究されている[4, 5, 6, 7, 8, 9]。今後、非磁性基底状態を持つ物質も合成されるものと期待され、混合スピン系における量子相転移現象は興味深い研究テーマとなっている。

我々は、非線型シグマ模型法、修正スピン波法、クラスター展開法などを用いて1次元、2次元混合スピン系における量子相転移について系統的な研究を行ってきた[6, 7, 8, 9]。研究会では、これまでに得られた成果について全般的な報告をしたが、ここではその中からクラスター展開を用いた2次元混合スピン模型における量子相転移について簡単にまとめる[9]。

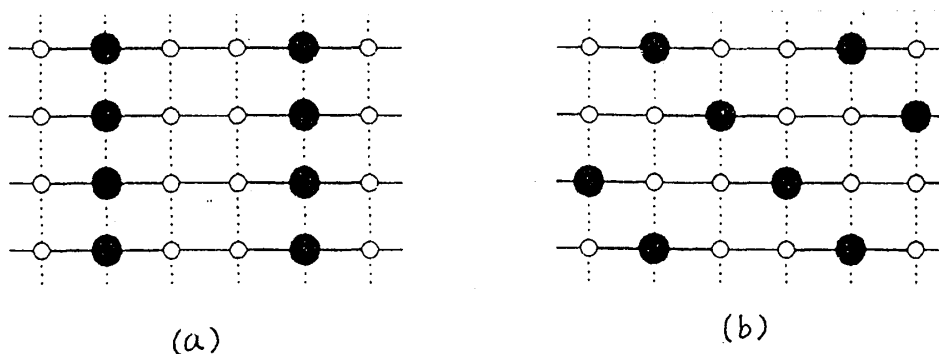
ここで考える混合スピン系は、第1図、2図に示した2次元量子スピン系である。これに対するハミルトニアンは

$$H = H_0 + H_1, \quad (1)$$

$$H_0 = J_1 \sum_{i,j} S_i \cdot S_j, \quad (2)$$

$$H_1 = J_2 \sum_{i,j} S_i \cdot S_j + J_3 \sum_{i,j} S_i \cdot S_j, \quad (3)$$

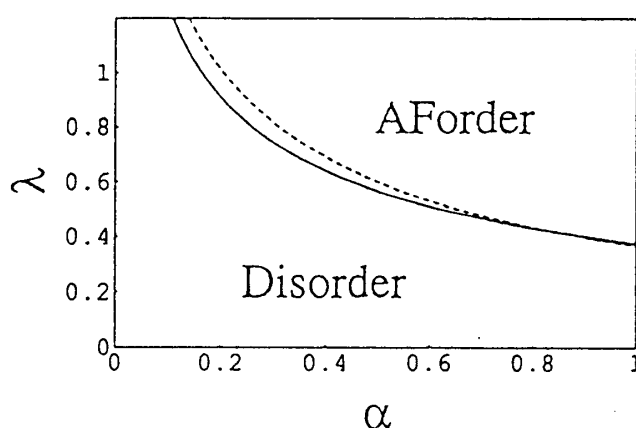
で与えられ、各格子点にはスピン1, 1/2のどちらかがいるものとする。



第1図 混合スピン模型。大きい黒丸がスピン1、小さい白丸がスピン1/2である。実線は J_1 、細線が $J_2 \equiv \lambda J_1$ 、破線が $J_3 \equiv \alpha \lambda J_1$ の反強磁性相互作用を表している。

ここでは、「混合スピクラスター展開」を用いるため、無摂動ハミルトニアン H_0 として、太い実線で結ばれた3個のスピ $1/2$ - 1 - $1/2$ の孤立一重項クラスターの集まりを考える。摂動項 H_1 として、このクラスターを横方向に J_2 、縦方向に J_3 で結びつけるものを選ぶ。ただし、結合はすべて反強磁性的なものと仮定する。

これらの2つの混合スピ系に対して、 $J_2/J_1 \equiv \lambda$ および $J_3/J_1 \equiv \alpha\lambda$ に関するクラスター展開を4次まで行った。このようにして求めたスピ交代帯磁率にパデ近似を適用し、その発散点から量子相転移点を見積もった（非磁性から反強磁性相へ）。得られた相図を第2図に示した。まず、図1(a)に示したスピ系に対して考察を行う。 λ, α が小さい時には、3つのスピからなる一重項クラスターの性質が支配的で、系はスピギャップを持つ。 λ, α が大きくなっていくと、徐々に2次元性が強くなり、反強磁性揺らぎが増幅され、最終的に反強磁性相へと転移する。第1(b)図の模型にも同じような量子相転移が観測されるが、相境界が2つの模型で微妙に異なっていることがわかる。たとえば、 α が大きい領域では、第1(b)図の模型のほうが、より反強磁性を示しやすくなっている。この理由は、 α が大きい極限で、第1図の模型は1次元混合スピ鎖（ギャップフル）に帰着するのに対して、第2図の模型は依然として2次元のネットワークを構成するためである。このように、混合スピ鎖をつないで2次元系を構成する場合そのスタックの仕方によって系の性質も変わってくる。



第2図 相図。実線が図1(a)、破線が図1(b)の模型に対応している。

ここでは、紙面の都合上クラスター展開法による混合スピ系の研究のみを紹介したが、他の方法による結果については原論文を参照していただきたい[6, 7, 8, 9]。今後とも、混合量子スピ系は精力的に研究され、量子スピ系の新たな側面を切り出してくれるものと期待される。

参考文献

- [1] G. T. Yee, J. M. Manriquez, D. A. Dixon, R. S. McLean, D. M. Groski, R. B. Flippen, K. S. Narayan, A. J. Epstein and J. S. Miller: *Adv. Mater.* **3** (1991) 309; *Inorg. Chem.* **22** (1983) 2624; *ibid.* **26** (1987) 138.
- [2] A. K. Kolezhuk, H.-J. Mikeska and S. Yamamoto: *Phys. Rev.* **B55** (1997) 3336; S. Brehmer, S. Yamamoto and H.-J. Mikeska, *J. Phys. Condensed Matter* **9** (1997) 3921; S. Yamamoto et al.: *Phys. Rev.* **B57** (1998) 13610; S. Yamamoto and T. Fukui *Phys. Rev.* **B57** (1998) 14008; S. Yamamoto et al.: *J. Phys. Condensed Matter*.
- [3] S. K. Pati, S. Ramasesha and D. Sen: *Phys. Rev.* **B55** (1997) 8894; F. C. Alcaraz and A. L. Malvezzi: *J. Phys.* **A30** (1997) 767; H. Niggemann, G. Uimin and J. Zittartz: *J. Phys. Cond. Matt.:* **9** (1997) 9031.
- [4] H. J. de Vega and F. Woynarovich: *J. Phys.* **A25** (1992) 449; M. Fujii, S. Fujimoto and N. Kawakami: *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996) 2381.
- [5] T. Tonegawa, T. Hikihara, T. Nishino, M. Kaburagi, S. Miyashita and H.-J. Mikeska: *J. Phys. Soc. Jpn.* **67** (1998) 1000.
- [6] T. Fukui and N. Kawakami: *Phys. Rev.* **B55** (1997) R14712; *Phys. Rev.* **B56** (1997) 8799.
- [7] A. Koga, S. Kumada, N. Kawakami and T. Fukui: *J. Phys. Soc. Jpn.* **67** (1998) 622.
- [8] A. Koga, S. Kumada, and N. Kawakami: *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** (1999) 642.
- [9] A. Koga, S. Kumada, and N. Kawakami: *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** (1999) No.7.