

25. 擬一次元基底一重項磁性体の磁気励起

牧 野 潤 一

基底一重項磁性体とは、単一イオンとしての基底状態が縮退していない磁性イオンからなる磁性体を指す。その代表的な例は、 $RFeX_3$ ($R=Rb, Cs$; $X=Cl, Br$) である。これらの磁性体では、 Fe^{2+} イオンのつくる一次元鎖が三角格子を組んでいるため、擬一次元磁性体として、また三角格子磁性体として注目を集めている。 $RFeX_3$ の磁性は次のスピンハミルトニアン ($S=1$) でよく記述される：

$$H = \sum_i D S_{iz}^2 - \sum_i J_1 \vec{S}_i \vec{S}_i - \sum_i J_2 \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (D > 0)$$

第一項は一イオン型の異方性エネルギーを表わし、 $D > 0$ であるため一イオンとしての基底状態は一重項 ($S_z=0$) である。鎖内交換相互作用 J_1 は、 $X=Cl$ では強磁性的、 $X=Br$ では反強磁性的である。また、鎖間交換相互作用 J_2 は反強磁性的で $|J_2| \ll |J_1|$ である。基底一重項磁性体の大きな特徴は、交換相互作用と異方性エネルギーの比がある値以上の時にのみ秩序状態を示し、無秩序から秩序状態への転移はある特定マグノンのソフト化によって引き起こされることである。 $J_1 > 0$ で秩序状態を示す $RbFeCl_3$ についてはもっとも精力的に研究がなされ、その磁性は Dynamical Correlated-Effective-Field 近似 (DCEFA) に基づいて定量的によく理解されている。

本修士論文では、まず第一に $J_1 < 0$ でかつ秩序状態を示さない $CsFeBr_3$ の磁性、特にその磁気励起 (マグノン) を DCEFA に基づいて研究した。低温で観測されているマグノンの分散から定めた D, J_1, J_2 の値は $D=0.46$ THz, $J_1=-0.085$ THz, $J_2=-0.0085$ THz である。 $J_2/J_1=0.1$ なので一次元性はあまりよくない。次に、このパラメータを用いて計算したマグノンエネルギーの温度変化は実験結果を非常によく説明し、従って DCEFA は秩序状態を示さない反強磁性的基底一重項磁性体に対しても非常に有効であることが明らかになった。

第二に、 $J_2=0$ すなわち純粋に一次元でかつ $J_1 < 0$ の系 (ハルデン系) についてその磁気励起を DCEFA に基づいて研究した。 $T=0$ K でのマグノン分散におけるギャップを D/J_1 の関数として調べた結果、 D の減少とともに単調に減少し $D=0$ ではギャップも零になった。 D の大きいところでのギャップは数値計算で得られた結果とよく一致するが、 D が小さいところでの不一致は大である。厳密な数値計算の結果によれば $D=0$ でもギャップが存在している (ハルデンギャップ)。従って、一次元等方的な系においては DCEFA による取扱い是不十分であると言える。次に、ハルデン系に $T=0$ K で磁場をかけた場合を DCEFA で調べた結果を得た。磁場が z 方向に垂直の場合には磁化は磁場の強さとともに単調に増加する。磁場が z 方向の場合には、最初、磁化は零であり、ある臨界磁場で単調に増加し始め、さらに高い臨界磁場で飽和する。

最後に、DCEFA の改良を目的として Pair Dynamical Correlated-Effective-Field 近似の定式化を行なった。