

競合量子スピン鎖における Lifshitz 温度

岡山大学 理学部 原田 勲¹, 石井文彦
和歌山高専 青山 敏生

競合する交換相互作用をもつ 1 次元量子スピン鎖の熱力学的特徴は、静的スピン構造因子の温度変化に端的に現れることを、量子転送行列法を用いて示す。即ち、静的スピン構造因子は波数 q_0 で最大値を取るが、 q_0 は Lifshitz 温度と呼ばれる温度で整合値 π からずれ出し、温度上昇と共に $\pi/2$ に漸近する。私達は、このような特徴がスピナーパイエルス物質として知られている CuGeO_3 において、観測可能であることを示す。

1 はじめに

1 次元量子スピン系における spin gap は、当初非常に特殊な系で起きる現象と考えられていたが、その後 ladder 系など様々な系で発見され、しかもその spin gap と高温超伝導体の発現機構との関連が指摘されて以来、ますます活発に研究されてきた。これらの spin gap は spin singlet dimer に起因し、系の低次元性と相互作用の競合がもたらすものであることが明らかになりつつある。

私達は、それら相互作用の競合がどのような物理量に反映し、かつどのような手段で観測できるかを議論する。特にこれまであまり議論されていない、有限温度での振る舞いを、以下の Hamiltonian で記述される系について調べる：

$$\mathcal{H} = 2J \sum_n [\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + j \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+2}], \quad (1)$$

ここで $J(>0)$ は最近接交換相互作用定数、 $j(\geq 0)$ は次近接交換相互作用定数と最近接交換相互作用定数の比、また、 $\mathbf{S}_n$ は n 番目の site の spin-1/2 演算子を表す。

この Hamiltonian は spin gap を生じる系として知られ、これまで数多くの研究がある [1]。この系の基底状態は、 $j > j_c = 0.24$ の時、singlet dimer order を示し triplet state との間に gap が存在する。一方、 $j \leq j_c$ の時は gapless で $j = 0$ の時と同様に spin liquid state となることが知られている。このように、次近接相互作用は系に相互作用の競合と共に、基底状態の相転移をも導入する。この Hamiltonian は、spin-Peierls 物質として盛んに研究されている CuGeO_3 の

¹E-mail:harada@cc.okayama-u.ac.jp

spin-Peierls 温度 (14K) 以上での振る舞いを記述するものとして、再び注目されている ($j \simeq 0.36$)[2].

私達はこのような系の有限温度での振る舞いを明らかにするために、量子転送行列法を導入し、実験で直接観測可能な、静的スピン相関関数の Fourier 変換であるスピン構造因子の温度変化を再現し、その特徴を明らかにする.

2 手法

Hamiltonian (1) で記述される量子スピン鎖の熱力学量を求めるため、分配関数の表式に、鈴木-Trotter 公式を適用し、古典系にマップする. 私達の場合、次近接相互作用のため 4 スピクラスターに分解された量子スピン系が、2 枚のチェッカーボードからなる古典系にマップされる [3]. この古典系に通常の転送行列法を適用し、その固有値と固有関数からエネルギーやスピン相関関数などが求められる. 特に、転送行列法は、鎖方向に無限の和を取ることが可能で、静的スピン構造因子 $S(q)$ の波数依存性などの計算に適している. ただし、Trotter 数は、古典系がチェッカーボード 2 枚から出来ているため、通常の最近接相互作用系の時ほど大きく取れない. この欠点を補うため、私達は DMRG 法を転送行列法に適用し、その収束性をチェックしている.

3 結果

前章で述べた方法を用いて、熱力学量を求めた結果を以下に述べる. 特にここでは、静的スピン構造因子 $S(q)$ の温度変化に絞り議論する.

$S(q)$ は、波数 $q = q_0$ (格子定数は 1 とする.) で最大値を取る Lorentzian 型のシェイプで表される. これは、系が 1 次元で、短距離秩序をもつことの現れである. 図 1 に見られるように、 q_0 は温度および j の関数として振る舞う. 特に注目すべき点は、 $0.25 < j < 0.5$ に対して、低温で $q_0 = \pi$ を取る q_0 が Lifshitz 温度 t_L を越えると π からずれ出すことである. 高温側では incommensurate な値を取り、温度の上昇と共に $\pi/2$ に漸近する. これは、古典系基底状態における反強磁性-Heli 磁性相転移に相当するが、量子スピン系では j の大きいところで基底状態は Helical 相ではなく Dimer 相であることに注意しよう. 更に、遠距離でのスピン相関関数は、 t_L より低温の Disorder 温度 t_D ですでに incommensurate な振動を示し始める. また、 t_D と t_L 曲線は $t \rightarrow 0$ でも一致しない. これらは、系が示す熱的および量子力学的揺らぎに起因するものと理解されている.

次に、スピン構造因子 $S(q)$ の温度変化を具体的に見てみよう. 図 2 に見られるように、Lifshitz 温度 近くでは、 $S(q)$ は Lorentzian とはかけ離れた形となる. 特に、Lifshitz 温度では、Lorentzian で定義される $S(q)$ の幅は発散する. この幅の

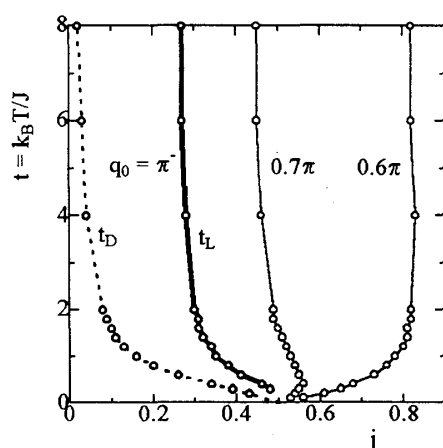


図 1: Contours of the $q_0=\text{constant}$ curves, where q_0 denotes the wavenumber for a maximum value of $S(q)$. The thick solid curve represents the Lifshitz line t_L while the dotted curve denotes the disorder line t_D .

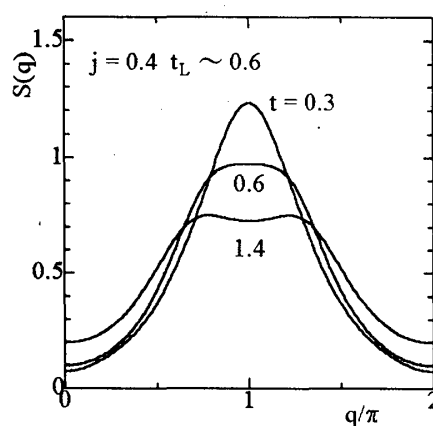


図 2: Temperature dependence of $S(q)$ for $j = 0.4$; below, at, and above $t_L (\equiv k_B T / J)$, which is estimated to be 0.6 in this case.

発散の影響は、この温度よりかなり低温においても認められ、次近接相互作用の実験的検証には都合が良い。

4 まとめ

以上、競合する相互作用を有する量子スピン鎖の特徴は、その静的スピン構造因子 $S(q)$ の温度変化に端的に現れることを見てきた。特に、 $0.25 < j < 0.5$ をもつスピン鎖では Lifshitz 温度が存在し、それは $S(q)$ の温度変化から容易に読みとれるし、またそのシェイプの解析から j の定量的な評価が出来る。

具体的な候補として、スピン-パイエルス物質として知られている CuGeO_3 を考えよう。現在のところ、 $j = 0.36$ という評価がある一方、その値は大きすぎるという意見もある。もし、 $j = 0.36$ が正しいならば、Lifshitz 温度は $T_L \simeq 50\text{K}$ と見積もられ、その温度で静的スピン構造因子が通常の Lorentzian とかけ離れたものかどうか調べるのは比較的容易であろう。既に、preliminary な結果も報告されている [4]。50 K 近傍における静的スピン構造因子の更なる精密測定は、その温度が、これまで j の定量的な評価を困難にしてきた鎖間相互作用やスピン-パイエルスひずみによる相互作用の変化から解放された高温であるが故に、 j の定量的な評価を可能にし、従って、この系の新しい側面を切り拓くものと期待される。

謝辞

実験に関する新井正敏教授 (KEK), 藤田全基博士 (京大) との議論は有益であった。ここに深く感謝する。また, 西山由弘博士との議論, 計算に関する助言, および, 高雄時久氏の研究初期段階での協力も研究の発展に欠かせなかった。合わせて感謝する。

参考文献

- [1] 例えば, I. Harada and T. Tonegawa, *Recent Advances in Magnetism of Transition Metal Compounds* (Edited by A. Kotani and N. Suzuki), p.348 World Scientific, Singapore (1993).
- [2] 例えば, 長谷正司, 固体物理 **30** (1995), 1021.
- [3] I. Harada, T. Kimura and T. Tonegawa, J. Phys. Soc. Jpn. **57** (1988), 2779.
- [4] 藤田全基, 神戸大学大学院自然科学研究科, 平成10年度博士論文.