

交換相互作用を介して非線形格子振動と量子スピンの結合した系のダイナミクス

千葉大学 自然科学研究科 山崎 久嗣¹, 夏目 雄平

大阪市立大学 工学研究科 寺井 章, 中村 勝弘

3角格子上に3つの大きさ1/2の量子スピンの局在しており、さらにスピンサイト間の距離に依存する交換相互作用によって格子振動と結合しているモデルを考える。このモデルが Longuet-Higgins *et al.*, Proc.R.Soc.A.**244**,1(1958) によって提案された動的ヤーンテラー系 $E_g \otimes e_g$ と対応している。このことを Phys.Rev.Lett.**54**,861(1985) によって提案された Nakamura-Bishop 基底に変換させることによって示す。さらに、カイラルオーダーパラメータ $\hat{\chi} = \mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3)$ のエネルギーに対する振る舞いと $E_g \otimes e_g$ バイブロニックモデルの電子軌道角運動量 $\hat{\ell}_z$ の振る舞いとの関係を明らかにする。つまり、エネルギー増加に伴うバイブロニック構造における $\langle \hat{\ell}_z \rangle$ の期待値が規則振動する振る舞いが $\langle \hat{\chi} \rangle$ にも見られる。さらに格子振動の非線形性を付け加え増加させることによって $\langle \hat{\chi} \rangle$ が不規則振動になり、急激に減衰することを示す。

格子サイトの1,2,3に3つのスピン1/2が局在している量子スピン系を考える。隣り合ったスピン間に働く相互作用は反強磁性交換相互作用 J_A, J_B, J_C として表され、格子振動の影響を考慮し J が格子点距離の関数であることを考えると $J_A = J(1 + \alpha/2(Q_1 - \sqrt{3}Q_2))$, $J_B = J(1 - \alpha Q_1)$, $J_C = J(Q_1 + \alpha/2(Q_1 - \sqrt{3}Q_2))$ と書ける。さらに Nakamura-Bishop 基底を使ってハミルトニアンを変形すると、変換後のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} / \left(-\frac{3}{4} \hbar^2 J \right) = \begin{matrix} & |k=0\rangle & |k=\frac{2\pi}{3}\rangle & |k=-\frac{2\pi}{3}\rangle \\ \begin{matrix} \langle k=0| \\ \langle k=\frac{2\pi}{3}| \\ \langle k=-\frac{2\pi}{3}| \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \alpha(-Q_1 - iQ_2) \\ 0 & \alpha(-Q_1 + iQ_2) & -1 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (1)$$

となる。この Hamiltonian の第1成分は独立である。以上の計算によりこの系が格子振動系が2次元 Q_1, Q_2 でスピン系も2重縮退した2次元系に帰着した。第1成分を除いた第2, 第3成分は容易にユニタリー変換でき、その変換後の行列が動的ヤーンテラー系の相互作用と一致している。

今回量子スピン系の特徴的なカイラルオーダーパラメータを量子カオスの測度に選ぶことにする。Nakamura-Bishop の基底を使うことによってカイラルオーダーパラメータ

$$\hat{\chi} = \mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3) \quad (2)$$

の期待値を計算することができ、 $\hat{\chi}$ は3角格子反強磁性体のフラストレーションの程度を特徴づけることができる [1,2]。期待値 $\hat{\chi}$ は E_g 状態それぞれ

$$\begin{aligned} \langle k = \frac{2\pi}{3} | \hat{\chi} | k = \frac{2\pi}{3} \rangle &= -\frac{\sqrt{3}}{4} \equiv -\Xi_\chi \\ \langle k = -\frac{2\pi}{3} | \hat{\chi} | k = -\frac{2\pi}{3} \rangle &= \frac{\sqrt{3}}{4} \equiv \Xi_\chi. \end{aligned} \quad (3)$$

¹E-mail:hisa@physics.s.chiba-u.ac.jp

となる。 $(\langle k=0|\hat{\chi}|k=0\rangle = 0$ は今、無関係なもので $|k=0\rangle$ がエネルギーが縮退しているものよりも高い a_{1g} モード (伸縮モード) と結合しているものである。) このように $|k=\pm\frac{2\pi}{3}\rangle$ 状態とスピン格子系のカイラルオーダーパラメータ $\hat{\chi}$ は動的ヤーンテラー系の $|\phi_{\pm}\rangle$ と $\hat{\ell}_z$ と一致している。固有状態 [3] も同じ形を取り、 p 番目の固有状態の $\langle\hat{\chi}\rangle_p$ エネルギー依存性は

$$\langle\hat{\chi}\rangle_p = \sum_{n=1}^{\infty} |a_{n,p}|^2 (-1)^n \Xi_{\chi} \quad (4)$$

となる。これが意味するところは $\langle\hat{\chi}\rangle_p$ の振る舞いが $\langle\hat{\ell}_z\rangle_p$ [3] の解析を使って説明できるということを示してる。実際に $\langle\hat{\chi}\rangle_p$ の期待値の振る舞いはエネルギー増加に伴い規則的な振る舞いをしており (図.1(a) より)、これは動的ヤーンテラー系の $\langle\hat{\ell}_z\rangle_p$ [3] と一致している。さらに非調和項 (戸田ポテンシャルの3次の項までとることにする $-\frac{3}{4}\alpha^3(Q_1^3 - 3Q_1Q_2^2)$)

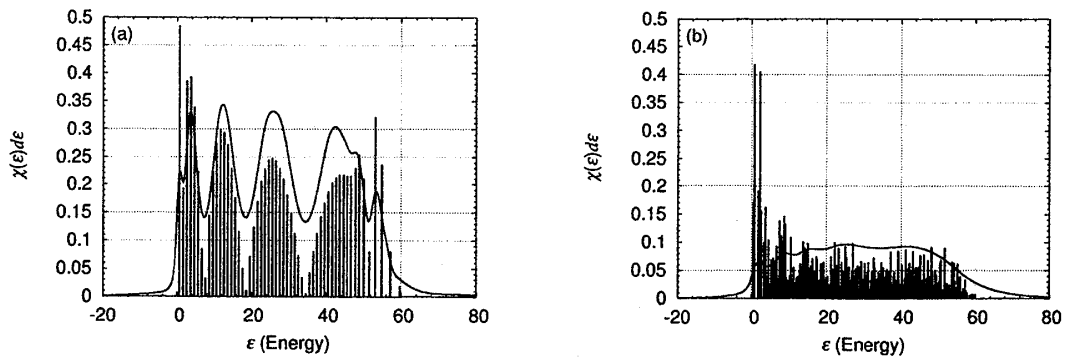


図 1: カイラリティ因子のエネルギー (ε) 依存性。カイラリティ因子の平均値とは $\chi(\varepsilon)d\varepsilon(=\sum_p |\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n a_{n,p}^2| d\varepsilon)$ であり、 $\varepsilon = 0.25 \Xi_{\chi}$ のエネルギー単位は $\varepsilon = 0.25$ である。(a) と (b) はそれぞれ $\gamma = 0, 1.41$ に当たる。格子スピン間の相互作用の強さは $\alpha = 0.707$ であり、エネルギーの単位は $\hbar\omega$ である。包絡線はそれぞれのピークに対してガウス関数で描いたものである。(このグラフは [3] の計算結果を現在の量子スピンのモデルに適応したものである。)

を加えると図 1(b) のように規則的な振動をしていた $\langle\hat{\chi}\rangle$ が非線形性の増加とともに不規則化し急激に減衰する。以上の結果は、動的ヤーンテラー系と同じ結果であり、量子カオスの兆候がカイラルオーダーパラメータを通して見られたことがわかる。結論としてフラストレートされた 3 角格子反強磁性体が格子振動と結合した量子スピン系は $E_g \otimes e_g$ の動的ヤーンテラー系と等しいことがわかった。量子スピンと格子振動が結合することによってカイラルオーダーパラメータ $\langle\hat{\chi}\rangle$ のエネルギー依存性を見ることによって非線形性を加えていくことで規則的な振動から不規則振動に移り変わる。このことをもってカイラルオーダーパラメータが量子カオスを示すことがわかった。詳しくは [4] を参照。

- [1] K.Hirakawa, Hiroaki Kadowaki and Koji Ubukoshi, J.Phys.Soc.Jpn.**54**,3526(1985)
- [2] K.Takeda, K.Miyake and K.Takeda and K.Hirakawa, J.Phys.Soc.Jpn.**61**,2156(1992)
- [3] H.Yamasaki, Y.Natsume, A.Terai and K.Nakamura, Phys.Rev.E**68**,046201(2003)
- [4] H.Yamasaki, Y.Natsume, A.Terai and K.Nakamura, (投稿中), preprint nlin.CD/0312039