

平成22年6月2日現在

研究種目：基盤研究（C）
 研究期間：2006～2009
 課題番号：18540340
 研究課題名（和文） 低次元量子スピン系におけるボンド変化とフラストレーションの競合と協力
 研究課題名（英文） Competition and cooperation between the bond change and the frustration in low-dimensional quantum spin systems
 研究代表者
 岡本 清美（OKAMOTO KIYOMI）
 東京工業大学・大学院理工学研究科・助教
 研究者番号：10114860

研究成果の概要（和文）：

ボンド変化とフラストレーションのある1次元量子スピン系について種々の性質を調べた。対象とした主なものは、歪んだダイヤモンド型スピン鎖、二等辺三角形スピントューブ、 $S=1$ スピンと $S=2$ スピンの交代スピン鎖、フラストレートした $S=1$ スピン鎖、スピンギャップ系の有限磁場中の帯磁率と比熱の温度依存性の異常、などである。用いた手法は厳密解、摂動論、実効ハミルトニアン法、数値的対角化、密度行列繰り込み群法などである。

研究成果の概要（英文）：

We investigated one-dimensional quantum spin systems with bond changes and frustrations. The models we treated were: distorted diamond type spin chain, isosceles triangle spin tube, $S=1$ and $S=2$ alternating spin chain, $S=1$ spin chain with frustrations, anomalies of susceptibility and specific heat of spin gap system in finite magnetic field, and so on. We used the exact solution, perturbation method, numerical diagonalization and density matrix renormalization group.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,600,000	0	1,600,000
2007年度	600,000	180,000	780,000
2008年度	600,000	180,000	780,000
2009年度	600,000	180,000	780,000
年度			
総計	3,400,000	540,000	3,940,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：磁性、量子スピン、量子相転移、フラストレーション、競合相互作用、ボンド変化、低次元系、磁化プラトー

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初直近に、ボンド変化とフラストレーションの相乗作用で非常に興味深い例が発見された。その一つは、次近接相互作用

用とボンド交代のある $S=1/2$ スピン鎖の磁場中の問題で、両者のバランスと磁場の大きさによって、格子と整合的なスピン相関が優勢になったり非整合的なそれが優勢になった

り、状況が変わるというものである。したがって、スピン鎖間に相互作用がある準1次元系では、格子と整合的なスピン秩序が起きたり非整合的なスピン秩序が起きたりすることになる。結合パラメーターが適当であれば、磁場によって両者の入れ替わりも観測できる可能性がある(N. Maeshima, K. Okunishi, K. Okamoto, T. Sakai and K. Yonemitsu: Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 127203)。F₅PNN と略称される有機磁性体ではそのような現象が起きている模様であり、現実の物質との関連でも非常に重要な例である。なお、どちらのスピン相関が優勢かは飽和磁化の 1/2 における磁化プラトー問題とも極めて密接に関連している。

上の一例で見られるように、ボンド変化(alternation や trimerization)とフラストレーションはあるときは競合し、あるときは協力して従来の常識とは異なった磁氣的ふるまいを創出する。フラストレーション自体もちろん競合相互作用であるが、上のことはもう一段階層が異なった意味でボンド変化とフラストレーションが競合あるいは協力していると見ることができよう。

本研究の特色であり独創的発想であった「一段違う階層におけるボンド変化とフラストレーションの競合と協力」という視点に基づく研究は研究開始時点ではほとんど見られなかった。

2. 研究の目的

本研究の主要な目的は、低次元反強磁性量子スピン系において、空間的格子構造に起因するボンドの変化とフラストレーションの相乗効果を理論的(解析的および数値的)に調べることであった。

量子スピンの Heisenberg モデルにおいて、スピン間の相互作用は空間的格子構造によって決まり、スピン間の距離やボンドの角度に敏感に依存する。したがって、微妙な格子構造の変化が、例えばボンドの交代(bond alternation あるいは bond dimerization)や 3 量体的スピン相互作用(trimerization)、などのボンド変化をもたらす。また、ジグザグ的構造が比較的強い次近接相互作用を生み、相互作用にフラストレーションをもたらす、などフラストレーションも空間的格子構造と密接に結びついている。以上のような状況に鑑み、ボンド変化とフラストレーションの競合と協力を種々のモデルで調べることは、磁性理論や統計物理学的立場から興味深いことであるのみならず、現実の物質の磁氣的性質の解明、あるいは物質合成や探索の指針を与える点でも重要である。本研究ではボンド変化とフラストレーションを併せ持つ種々のモデルに対して、どのようなことが起こるか、それはどのようなパラメーターで実

現可能なのか、などを精密に示して見せることを目標とした。

3. 研究の方法

用いた手法は厳密解、摂動論、実効ハミルトニアン法、数値的対角化、密度行列繰り込み群法などである。研究の実施に当たっては、諸氏に随時協力をいただいたが、主な方々は坂井徹(原子力開発機構)、奥西巧一(新潟大学)、糸井千岳(日本大学)、野村清英(九州大学)、佐藤正寛(理化学研究所)、大塚雄一(理化学研究所)、中野博生(兵庫県立大学)、である(敬称略)。

4. 研究成果

(1) ボンド交代とフラストレーションのあるスピン鎖における、格子と整合的である秩序と非整合的である秩序との競合は、F₅PNN と略称される有機磁性体で起こっているのではないかと思われる。この物質に対応すると考えられるモデルを詳細に検討し、さらにいわゆる supersolid の可能性についても論じた。

(2) フラストレーションと三量体性が共存するモデルでスピン間相互作用の異方性が XXZ 的であるとき、ハミルトニアンと状態関数の異方性逆転現象とも呼ぶべき現象が起こる。このようなモデルを詳細に検討し、相図で新奇なタイプの多重臨界点が見られることを見いだした。

(3) 梯子型スピン系における 4 体循環交換スピン相互作用の影響について調べた。

(4) S=1 と S=2 のスピンが交互に並ぶ鎖状磁性体は実際に合成されていて(Ni と Mn が磁性を担っている)、この系ではスピン間相互作用 J をかなり広範囲にコントロールできるため、いわゆる一軸異方性 D との大きさの関連が通常の $J \gg D$ に加えて $J \ll D$ の状況も作り出すことができる。我々は種々の手法を用いてこのモデルを解析し、高スピンの内部自由度を反映した非常に興味ある相図を得た。有限磁場中の磁化プラトーの存在およびその機構についても調べた。

(5) アズライト(藍銅鉱)の磁性は歪んだダイヤモンド型スピン鎖モデルでよく記述されると思われるが、実験データから相互作用パラメーターを定量的に決定することを試みた。また、この物質では構造的特徴からジャロンシンスキー・守谷相互作用が存在すると考えられるので、磁化過程などに対するその効果も議論した。

(6) 励起ギャップのあるスピン鎖にギャップ

プエネルギーより大きな磁場を印可した場合の磁化の温度依存性に対するランダムネスの効果について厳密に解けるモデルを用いて調べた。用いたモデルは、 $S=1/2$ の XY 鎖にボンド交替とローレンツ型ランダム磁場が入ったモデルである。励起ギャップとランダムネスのバランスにより、磁化の温度依存性のパターンは複雑な様相を呈する。また、同様の現象が比熱についても起こることを初めて示した。

(7) いわゆる三角形スピントューブ ($S=1/2$) の基底状態について詳しく調べた。正三角形スピントューブではカイラリティが重要な役割を果たすが、それが二等辺三角形になった場合にどうなるかについては知られていなかった。我々は解析的理論と数値計算によって二等辺三角形型の場合について基底状態相図を得た。この結果は日本物理学会 2009 年年次大会のシンポジウム講演に選定された。

(8) $S=1/2$ の二等辺三角形型スピントューブについて、飽和磁化の $1/3$ のところで起きるプラトー状態に関して異常な現象を見出した。二等辺三角形が尖った形の場合と平たい形の場合とではプラトー機構に違いが見られて正三角形のところで機構が入れ替わると予想されるのであるが、DMRG による数値計算結果では機構交代の正三角形付近でプラトー幅が異常に増大する。プラトー機構が入れ替わるところではプラトー幅が顕著に減少する(しばしばゼロになる)のが通常であるので、我々は従来の常識と全く逆の新奇な振舞いを見出したことになる。我々はこのプラトー幅減少に対する解析的理論を構築し、上述の異常な振舞いをほぼ定量的に説明することに成功した。この異常領域では並進と反転の対称性が自発的に破れ、スタaggerド磁化、ダイマー、カイラリティの長距離秩序ができています。我々は、さらにこのような異常な振舞いが他の系でも起こりうることを示し、その発現条件を明確にした。(8)(9)の結果については J. Phys.: Cond. Matter よりレビュー論文執筆の招待があつて現在執筆中で、2010 年 6 月に提出予定である。

(9) 磁場中の歪んだダイヤモンド型スピントューブにおいては、磁場の大きさと量子パラメーターによって格子に整合的なスピン相関と非整合的なスピン相関の優劣が逆転しうることを明らかにした。我々の理論的予言の直後にそれを示唆していると思われる NMR の実験結果も発表されている。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者に

は下線)

[雑誌論文] (計 26 件)

① Kiyomi Okamoto, Masahiro Sato, Kouichi Okunishi, Toru Sakai and Chigak Itoi, Magnetization Plateau of the Quantum Spin Nanotube, to be published in Physica E, 査読有

② Toru Sakai, Kouichi Okunishi, Kiyomi Okamoto, Chigak Itoi and Masahiro Sato, Field Induced Exotic Phenomena of the $S=1/2$ Isosceles Three-Leg Quantum Spin Nanotube, J. Low Temp. Phys. **159**, 55-59 (2010), 査読有

③ Takashi Tonegawa, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai, First-order phase transition between one-third magnetization plateau states in an anisotropic $(S, S') = (1, 2)$ spin-alternating chain, Phys. Stat. Sol. (b) **247**, 688-690 (2010), 査読有.

④ Toru Sakai, Takashi Tonegawa and Kiyomi Okamoto, Field-induced nematic phase in the spin ladder system with easy-axis anisotropy, Phys. Stat. Sol. (b) **247**, 583-585 (2010), 査読有

⑤ Toru Sakai, Takashi Tonegawa and Kiyomi Okamoto, Elementary Excitations and Spin Dynamics in Nanowire Quantum Magnets, Int. J. Mod. Phys. C **20**, 1467-1476 (2009), 査読有

⑥ Yasuo Yoshida, Tatsuya Kawae, Yuko Hosokoshi, Katsuya Inoue, Nobuya Maeshima, Koichi Okunishi, Kiyomi Okamoto and Toru Sakai, Magnetic Field versus Temperature Phase Diagram of the Spin-1/2 Alternating Chain Compound F_5PNN , J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 074716-1-5 (2009)

⑦ T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, Y. Otsuka, K. Okamoto and C. Itoi, Quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube, Phys. Rev. B **78** 184415-1-11 (2008), 査読有

⑧ Takashi Tonegawa, Toru Sakai, Kiyomi Okamoto and Makoto Kaburagi, One-Third Magnetization Plateau in an Anisotropic $(S, S')=(1, 2)$ Spin-Alternating Chain, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 124701-1-8 (2007), 査読有

⑨ Toru Sakai, Kiyomi Okamoto and Takashi

Tonegawa, Quantum Spin Flop Transition in Nanowire Ferrimagnets, *Physica E* **40** 359-362 (2007), 査読有

⑩ Toru Sakai and Kiyomi Okamoto, Field-Induced Incommensurate Order in Frustrated Spin Ladder, *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 145231-1-5 (2007), 査読有

⑪ Nobuya Maeshima, Kouichi Okunishi, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai and Kenji Yonemitsu, Possibility of field-induced incommensurate order in a quasi-one-dimensional frustrated spin system, *J. Phys.: Condensed Matter* **18**, 4819-4826 (2006), 査読有

[学会発表] (計 102 件)

① Takashi Tonegawa, Hiroki Nakano, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai and Kiyohide Nomura, Ground-State Phase Diagram of an S=2 Chain with Bond-Alternation and Uniaxial On-Site Anisotropy, The workshop "New Trends in Quantum Magnetism", 2010 年 6 月 1 日, University Paris-Sud, Orsay, France

② 利根川孝, 中野博生, 坂井徹, 岡本清美, フラストレートした S=1 反強磁性鎖における磁化の 2 分の 1 プラトー II, 日本物理学会第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 22 日, 岡山大学津島キャンパス

③ 岡本清美, 佐藤正寛, 奥西巧一, 坂井徹, 糸井千岳, 3 本足スピナノチューブにおける磁化プラトー幅の新奇な振舞い, 日本物理学会第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 22 日, 岡山大学津島キャンパス

④ 坂井徹, 佐藤正寛, 奥西巧一, 岡本清美, 糸井千岳, スピントューブの磁化プラトーにおけるスタガード磁化, ダイマー及びカイラル秩序の共存, 日本物理学会第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 22 日, 岡山大学津島キャンパス

⑤ Kiyomi Okamoto, Toru Sakai, Masahiro Sato, Kouichi Okunishi and Chigak Itoi, Anomalous Behavior of the Magnetization Plateau Width of an S=1/2 Isosceles Triangle Spin Nanotube, 2010 年 3 月 8 日, International Symposium on Physics of New Quantum Phases in Superclean Materials, はまぎんホール, 横浜

⑥ Toru Sakai, Kiyomi Okamoto and Takashi Tonegawa, Magnetization Process of the

S=1/2 Distorted Diamond Spin Chain, 2009 年 12 月 8 日, 6th International Symposium on High Magnetic Field Spin Science in 100T, 東北大学

⑦ 坂井徹, 佐藤正寛, 奥西巧一, 大塚雄一, 岡本清美, 糸井千岳, 【シンポジウム講演】スピナノチューブ:最近の理論的發展 2009 年 3 月 28 日, 日本物理学会 2009 年年次大会, 立教大学池袋キャンパス

⑧ 坂井徹, 利根川孝, 岡本清美, 歪んだダイヤモンド鎖の磁場誘起非整合秩序, 2009 年 3 月 27 日, 日本物理学会 2009 年年次大会, 立教大学池袋キャンパス

⑨ 利根川孝, 中野博生, 坂井徹, 岡本清美, フラストレートした S=1 反強磁性鎖における磁化の 2 分の 1 プラトー, 2009 年 3 月 27 日, 日本物理学会 2009 年年次大会, 立教大学池袋キャンパス

⑩ Kiyomi Okamoto, Anomalous Temperature Dependence of the Magnetization of a Spin-Gapped Chain under Finite Magnetic Field, 2009 年 3 月 6 日, 4th JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium: X-Ray and High Magnetic Field, SPring8

⑪ Takashi Tonegawa, Hiroki Nakano, Toru Sakai and Kiyomi Okamoto, Half Magnetization Plateau in a Frustrated S=1 Antiferromagnetic Chain, 2009 年 3 月 6 日, 4th JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium: X-Ray and High Magnetic Field, SPring8

⑫ Kiyomi Okamoto, Anomalous Temperature Dependence of the Finite-Field Magnetization of a Bond-Alternating Quantum Spin Chain in Lorentzian Random Magnetic Field, 2008 年 11 月 8 日, The International Symposium on Anomalous Quantum Materials 2008 and the 7th Asia-Pacific Workshop, 東京大学

⑬ 岡本清美, 有限磁場中の 1 次元スピングリップ系とランダムネス, 2008 年 3 月 23 日, 日本物理学会第 63 回年次大会, 近畿大学大学本部キャンパス

6. 研究組織

(1) 研究代表者

岡本 清美 (OKAMOTO KIYOMI)
東京工業大学・大学院理工学研究科・助教
研究者番号：10114860

(2) 研究分担者

利根川 孝 (TONEGAWA TAKASHI)
福井工業大学・工学部・教授
研究者番号：80028167

(3) 連携研究者

なし