

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2006 ～ 2008

課題番号：18540341

研究課題名（和文） 強相関系における電子スピン共鳴の新理論展開

研究課題名（英文） New developments in theory of ESR in strongly correlated systems

研究代表者

押川 正毅 (OSHIKAWA MASAKI)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号：50262043

研究成果の概要：

これまで 1 次元スピンギャップ系の ESR について多くの実験が行われてきたが、理論な理解は進んでいなかった。そこで、1 次元スピンギャップ系の ESR に対する新たな理論的アプローチを定式化した。まず、磁場中の 1 次元スピンギャップ系において、朝永・ラッティンジャー流体領域と量子臨界領域の間のクロスオーバーが、温度の関数としての磁化の極小として普遍的に現われることを発見した。また、このような系の ESR シフトについて、広い温度・磁場領域で定量的な理論を得た。その結果は $S=1$ ハルデンギャップ系である NDMAP についての実験データと非常に良い一致を見た。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,700,000	0	1,700,000
2007 年度	800,000	240,000	1,040,000
2008 年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	3,400,000	510,000	3,910,000

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：物理学・物性 II

キーワード：磁気共鳴、磁性、スピンギャップ、電子スピン共鳴

1. 研究開始当初の背景

電子スピン共鳴(ESR)は、物性研究の最も基本的かつ重要な観測手段の一つである。物性科学における多くの興味ある問題について電子およびスピンの問題は中心的であり、ESR はその電子スピンのダイナミクスを直接観測する点で非常に強力である。しかも、比較的安価かつ環境負荷の小さな装置によって高精度のスペクトルを得ることができ、磁性を中心とした物性研究にとって貴重な

手段である。しかしながら、現状では、特に強相関系の物性研究について ESR のポテンシャルが十分活用されているとは言い難い。これは、実験データを解釈に必要な理論が十分発達していないことに主因がある。高周波 ESR などここ数十年の実験技術上の進歩、および物質科学の発展に伴って多くの新物質が研究の対象になってきたこと、などから ESR 理論の発展に対する要請はますます強まっている。

近年になって、研究代表者・押川と研究協力者・I. Affleck は 1 次元 $S=1/2$ Heisenberg 反強磁性鎖の低温領域での ESR について、場の理論による新しいアプローチを開発した。これは数十年ぶりに ESR 理論の基礎に関する発展をもたらすものであったが、適用範囲が低温の $S=1/2$ Heisenberg 鎖に限られていた。一方、同時期に研究分担者宮下等は厳密対角化に基づく ESR スペクトルの数値的 직접計算を行った。これは任意のモデルについて任意の温度で計算できる手法として有用であるが、厳密対角化に基づいているために $S=1/2$ で 10 サイト以下程度の小さな系しか扱えず、実験で見られるような連続スペクトルを議論することは難しい。従って、より一般の系に対して有効な ESR の理論体系の建設は大きな課題であった。

2. 研究の目的

1 次元系に関して、場の理論（ボソン化）による ESR 理論の適用限界を超えて、より一般的な系に適用できる理論を構築する。その一歩として、Haldane ギャップを持つ $S=1$ Heisenberg 反強磁性鎖など、スピングャップ系について磁場中での性質を記述する理論を整備し、これをもとにこのような系での ESR を定量的に記述する理論を開拓する。

3. 研究の方法

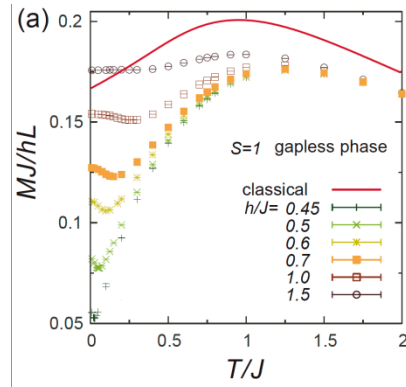
ESR は系の動的な性質であり直接数値計算は難しい。しかし、ESR 吸収強度の積分は近似的に帯磁率で与えられ、また金森・立木公式によると ESR シフトは異方性項によって表される物理量の期待値によって決まる。これらは静的な物理量であり、量子モンテカルロ法によって高い精度で数値的に求められる。得られた数値的な結果を、有効理論を用いた解析的な結果と比較検討する。

4. 研究成果

以下、主要なもの 2 点について述べる。

(1) ESR は磁場中・有限温度で観測されるため、スピングャップ系に対する磁場と温度の効果を明らかにすることがまず重要である。そこで、スピングャップ系における磁化の変化を温度と磁場の関数として考察した。また、磁化は ESR 吸収強度の積分値を近似的に与えるものとしても重要である。

Haldane ギャップを持つ $S=1$ 反強磁性鎖について、臨界磁場以上の磁場について量子モンテカルロ法によって磁化を求めたところ、図 1 のようになった。



[図 1] $S=1$ 反強磁性鎖における磁化/磁場の温度依存性。臨界磁場 $h/J = 0.41$ よりも高い、いくつかの値について示している。実際は、比較のために示した古典スピングャップ鎖についての厳密解である。

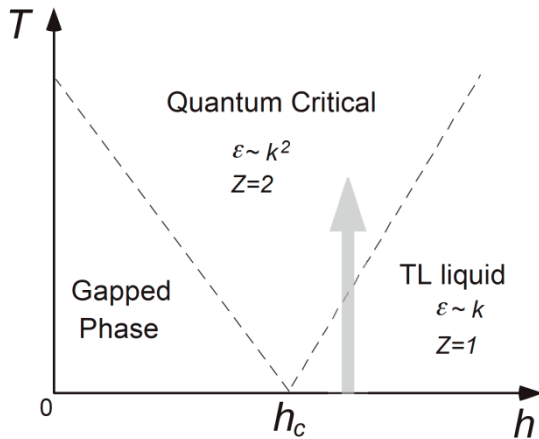
高温では、磁化/磁場の温度依存性は弱く、古典スピングャップ系とおおむね一致するふるまいを示している。しかし、低温では、磁場が小さいときに急速に減衰する。これは、臨界磁場以下ではスピングャップが存在し、磁化が指数関数的に抑制されることから自然に予想されることである。しかし、予想外の事実として、磁化に極小が存在し、より低温で再び磁化が増加することが見出された。

この事実を理解するため、まず絶対零度付近での磁化のふるまいについて議論した。絶対零度付近では、臨界磁場以上の系は朝永・Luttinger 液体として記述できる。この描像に基づき、共形場理論を適用することにより、磁化の低温展開の最低次がスピングャップ速度 v_F によって以下のように与えられることを見出した。

$$\frac{M}{L} = \frac{M_0}{L} - \frac{\pi}{6v_F^2} \frac{\partial v_F}{\partial h} T^2 + O(T^3).$$

スピングャップ速度は、臨界磁場の極限でゼロになり、その上では磁場の増大とともに増加するので、極低温では磁化は温度の減少関数となる。これと、高温での古典的なふるまい（温度の増加関数）をあわせると、磁化の極小が要請されることになる。

このことから、磁化の極小は、極低温での朝永・Luttinger 液体としてのふるまいと、高温での「量子臨界的」なふるまいの間のクロスオーバーを表していると理解することができる。

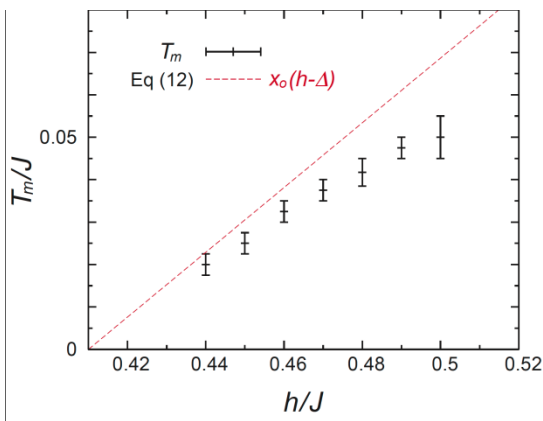


[図2] 1次元スピギャップ相の磁場誘起相転移に伴う有限温度「相図」。1次元では有限温度の相転移は起こらないが、異なる領域間のクロスオーバーは存在し、観測量に反映される。

また、さらに高い磁場を考えると、飽和磁場の付近では逆に磁化の極大が観測される。これは、飽和磁場付近では、素励起であるマグノンが磁場と反平行の磁化を持つことから自然に理解できる。磁化の極小が見られる領域と、極大が見られる領域の境界は、上述の共形場理論による結果から、スピン波速度の極大で与えられることが予想される。そこで、密度行列くりこみ群によってスピン波速度の磁場依存性を求めた。スピン波速度の極大を与える磁場付近では極低温での磁場の温度依存性がなくなり、これより小さい磁場では磁化の極小が、大きい磁場では磁化の極大が見られ、上記予想が検証された。

さらに、臨界点付近で成立する自由フェルミオン有効理論を用いて、磁化の極小を与える温度と磁場の線形な関係を導き、量子モンテカルロ計算の結果を用いてこれを確認した。

(図3)



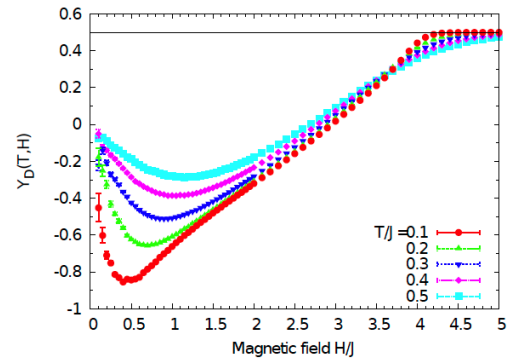
[図3] 磁化の極小を与える温度 T_m と、磁場の関係。破線は自由フェルミオン理論の予言する線形関係。量子モンテカルロ計算の結果は、臨界点付近で漸近的に理論と一致する。

この結果は、1次元量子系における普遍的なクロスオーバーを表すものとして、冷却原子気体や電子系など他の物理系にも応用されている。

(2) 一軸異方性を持つ $S=1$ Haldane 鎖における ESR シフトを、金森・立木公式

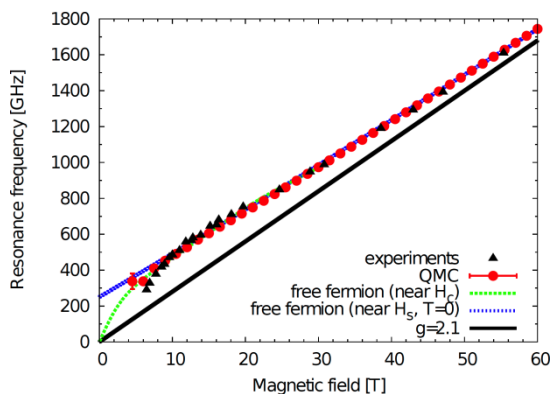
$$\delta\omega = -\frac{\langle [H', S_T^+, S_T^-] \rangle_0}{2\langle S_T^z \rangle_0}$$

によって評価した。先に前田らによって示されたように、金森・立木公式は異方性 H' に関する摂動の1次で厳密な公式である。また、この公式によれば ESR シフトの磁場の方向に関する依存性と、温度依存性を分離することができる。以下では、温度依存性の部分に注目して論じる。金森・立木公式の右辺は静的な量であるので、量子モンテカルロ法によって数値的に求めることができる。 $S=1$ Haldane 鎖についてこれを行い、図4の結果を得た。



[図4] $S=1$ Haldane 鎖における ESR シフトの磁場依存性を、いくつかの温度についてプロットしたもの。

興味深い事実として、シフトの符号が磁場によって反転することが見出された。さらに、このシフトを有効理論によって評価することも行った。低磁場側では、スピン1を持つ三重項マグノンが素励起であり、磁場により三重項が分裂する。この三重項マグノンの分布数の差がシフトを与える。一方、高磁場側では、スピンが完全に磁場に平行になった状態からのスピンフリップ状態を素励起(マグノン)と見なすことができる。これらの素励起の分布数を、自由フェルミオン近似によって評価することで、それぞれ臨界磁場より低磁場側と高磁場側で量子モンテカルロ計算の結果を良く再現することができた。さらに、一軸異方性を持つ $S=1$ Haldane 鎖のモデル物質である NDMAP において実験的に観測された ESR 周波数もこれらの理論で良く説明することができた。(図5)



〔図5〕一軸異方性を持つ $S=1$ Haldane 鎖に NDMAP における ESR 周波数。黒い実線は常磁性共鳴の周波数を示し、これとのずれが ESR シフトである。理論計算は NDMAP について先行研究で推定されたパラメータを用いて行っている。量子モンテカルロ計算は全磁場領域で実験と良く一致し、低磁場側の理論（緑破線）と高磁場側の理論（青破線）がそれぞれの領域で量子モンテカルロ計算と一致している。

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 8 件）

- (1) E. Zhao, X.-W. Guan, W. V. Liu, M. T. Batchelor, and M. Oshikawa, Analytic Thermodynamics and Thermometry of Gaudin-Yang Fermi Gases, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 140404 (2009) [4 pages]. (査読有り)
- (2) K. Motegi and K. Sakai, Form factors and correlation functions of an interacting spinless fermion model, *Nucl. Phys. B* **793**, 451-468 (2008). (査読有り)
- (3) K. Motegi and K. Sakai, Correlation functions of an interacting spinless fermion model at finite temperature, *JSTAT* (2008), P02005 [23 pages]. (査読有り)
- (4) F. Yamada, T. Ono, H. Tanaka, G. Misguich, and M. Oshikawa, Magnetic-Field Induced Bose-Einstein Condensation of Magnons and Critical Behavior in Interacting Dimer System, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 013701 (2008) [4 pages] (査読有り)
- (5) Y. Maeda, C. Hotta, and M. Oshikawa, Universal Temperature Dependence of the Magnetization of Gapped Spin Chains, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 057205 (2007) [4 pages]. (査読有り)
- (6) K. Sakai, Dynamical correlation functions of the XXZ model at finite

temperature, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, 7523-7542 (2007). (査読有り)

(7) M. Sato and M. Oshikawa, Magnon bands of N-leg integer-spin antiferromagnetic systems in the weak-interchain-coupling regime, *Phys. Rev. B* **75**, 014404 (2007) [10 pages] (査読有り)

(8) 堺和光、1次元量子系にみられる特異な輸送特性—厳密解からのアプローチ—、*物性研究* **87-2**, 214-266 (2006). (査読なし)

〔学会発表〕（計 8 件）

(1) 古谷峻介、前田義高、押川正毅 $S=1$ Haldane 鎖の ESR スペクトルの共鳴周波数シフトの摂動計算、日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 22 日、岡山大学

(2) M. Oshikawa, S. C. Furuya, Y. Maeda, and K. Sakai, Perturbation theory of the ESR frequency shift, Magnetic resonance in highly frustrated magnetic systems, February 4th, 2010, Kranjska Gora, Slovenia

(3) S. C. Furuya, M. Oshikawa, and I. Affleck, ESR of quantum spin chain in the classical limit, Magnetic resonance in highly frustrated magnetic systems, February 3rd, 2010, Kranjska Gora, Slovenia

(4) M. Oshikawa, S. C. Furuya, and I. Affleck, ESR in Heisenberg antiferromagnetic chains and the $O(3)$ nonlinear sigma model, Electron Magnetic Resonance of Strongly Correlated Spin systems, November 9th, 2009, Kobe University

(5) S. C. Furuya, M. Oshikawa, and I. Affleck, Electron spin resonance in $O(3)$ nonlinear sigma model, Electron Magnetic Resonance of Strongly Correlated Spin systems, November 9th, 2009, Kobe University

(6) 古谷峻介、押川正毅、Ian Affleck 電子スピン共鳴による低次元量子スピン系の古典ダイナミクスの研究、日本物理学会 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 27 日、熊本大学

(7) 古谷峻介、押川正毅、Ian Affleck 1次元古典非線形シグマ模型の ESR スペクトル、日本物理学会第 64 回年次大会、2009 年 3 月 27 日、立教大学

(8) 堺和光、ハイゼンベルク XXZ 鎖における有限温度動的相関関数とスピン拡散、日本物理学会第 62 回年次大会、2007 年 9 月 24 日、北海道大学

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

該当なし

○取得状況（計 0 件）

該当なし

〔その他〕

ホームページ等

<http://oshikawa.issp.u-tokyo.ac.jp/>

以下に、本報告後の研究の発展も掲載予定。

6. 研究組織

(1) 研究代表者

押川 正毅 (OSHIKAWA MASAKI)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号： 50262043

(2) 研究分担者

堺 和光 (SAKAI KAZUMITSU)

東京大学・総合文化研究科・助教

研究者番号： 10397028

（平成 20 年度：連携研究者）

宮下 精二 (MIYASHITA SEIJI)

東京大学・理学系研究科・教授

研究者番号： 10143372

（平成 20 年度：連携研究者）

太田 仁 (OHTA HITOSHI)

神戸大学・分子フォトサイエンス研究センター・教授

研究者番号： 70194173

（平成 20 年度：連携研究者）

(3) 連携研究者

(4) 研究協力者

Ian Affleck

University of British Columbia ・教授

前田義高

富士フイルム（株）解析技術センター

古谷峻介

東京大学大学院理学系研究科 大学院生