

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 22 日現在

機関番号：18001

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25610107

研究課題名(和文)量子スピン系におけるフォノンの効果とフラストレーションの関連性

研究課題名(英文)Relationship between Phonon Effects and Frustration in Quantum Spin Systems

研究代表者

安田 千寿(Yasuda, Chitoshi)

琉球大学・理学部・准教授

研究者番号：20398564

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：スピン-フォノン間相互作用をもつフォノン系において、フォノンの自由度を解析的に消去することにより、有効ハミルトニアンを導出する方法を開発した。この有効ハミルトニアンは、エネルギー的に競合するスピン間相互作用からなるフラストレート量子スピン系を記述している。さらに、この方法を、幾何学的構造変化を考慮した相互作用がある一次元系、フォノンによる鎖間相互作用がある高次元系、最近接・次近接スピン-フォノン間相互作用がある一次元系に適用できるよう拡張した。フォノン系とフラストレート量子スピン系を関連づける手法を用いることにより、二つの系の基底状態で生じる新奇な状態や相転移を関連させて理解することができた。

研究成果の概要(英文)：In phonon systems with spin-phonon interactions, we developed a method to derive effective Hamiltonians by removing a degree of freedom of phonon analytically. The effective Hamiltonians describe frustrated quantum spin systems with competing spin interactions energetically. Furthermore, we expanded this method to be applicable to the one-dimensional spin-phonon interaction systems with the geometric structure changes, the high-dimensional systems with the interchain interaction due to phonons, and the one-dimensional systems with the nearest-neighbor and next-nearest-neighbor spin-phonon interactions. We was able to understand the novel states and phase transitions to occur in the ground states of both the phonon system and the frustrated quantum spin system by using our method to connect the two systems.

研究分野：物性理論

キーワード：フォノン フラストレーション 量子相転移 有効ハミルトニアン

1. 研究開始当初の背景

絶縁体には、結晶を形成する原子の弾性振動と原子内の電子のもつスピンの性質を決めている物質がある。その代表例としてスピン・パイエルス物質がある。スピン・パイエルス物質は、スピンの反強磁性的に結合した擬一次元物質であり、その強い量子力学的効果により、格子が歪むと弾性エネルギーが増加するにもかかわらず、スピン系のエネルギー利得のため格子変形した状態が安定化することが分かっている。具体的には、格子変形のため近づいたスピン対が一重項状態を形成した結果、系全体として量子力学的な非磁性状態が実現している。スピン・パイエルス物質をモデル化した「スピン-フォノン間相互作用のある量子スピン系」のハミルトニアンは、格子振動の自由度を量子化したフォノンとスピンの相互作用からなるもので、1970年代から現在にいたるまで多くの理論的研究がなされている。このハミルトニアンがスピン・パイエルス物質の性質をよく表していることは、量子ゆらぎの効果を近似的に取り入れたハートリー・フォック近似や乱雑位相近似、ゆらぎの効果をさらに取り入れた位相ハミルトニアンの方法などを用いた研究により、明らかにされている。

「スピン-フォノン間相互作用のある量子スピン系」の数値計算的研究では、厳密対角化法や量子モンテカルロ法などによる研究があり、スピン・パイエルス物質における相転移や臨界現象、不純物効果などが調べられている。これらの方法には、上記の近似計算と異なり、量子ゆらぎの効果を完全に取り入れている利点がある一方、系のサイズが小さいことや量子モンテカルロ法の状態更新において膨大な計算時間が必要になることなどの問題があった。しかしながら、これらの問題は、最近の量子モンテカルロ法のアルゴリズムの発展[1]により解決に向かっており、この有力な計算手法を用いることにより、「スピン-フォノン間相互作用のある量子スピン系」の研究はさらに発展すると期待できる。

「フラストレーションをもつ量子スピン系」の研究はさらに古く、その代表例である三角格子における反強磁性イジング模型については、1950年から研究されている。フラストレーションは、スピン間に競合した長距離相互作用のある場合や、格子の幾何学的構造のために競合した相互作用のある場合に生じ、このとき、エネルギー的に安定したスピンの向きを簡単に見出すことができなくなる。さらに低励起状態にほぼエネルギーが等しい状態がたくさん存在し、分子場理論で予想される状態が安定にならない場合が多く、その量子力学的効果により予想もつかない状態が実現する可能性がある。特に、

スピン間に競合した長距離相互作用のある系では、次近接相互作用のある反強磁性 XXZ スピン鎖において、次近接相互作用の強さが最近接相互作用の強さの半分のとき、一重項対の直積が基底状態であることや、厳密対角化法やレベルスペクトロスコピー解析を用いて、ネール相、ダイマー相、XY 相の存在が示されている。しかしながら、フラストレーションがある系の研究では、小さいサイズの問題や量子モンテカルロ法が適用できないなどの多くの課題が残っており、新しい研究手法の開発が求められている。

2. 研究の目的

本研究課題では、これら「スピン-フォノン間相互作用のある量子スピン系」と「フラストレーションのある量子スピン系」が、あるユニタリー変換で関係していることに着目する。スピン-フォノン間相互作用のある一次元系のハミルトニアンにおいてフォノンの自由度をトレースアウトし、有効ハミルトニアンを導出すると、これは競合した長距離相互作用をもつフラストレーションのある量子スピン系の形をしていることが分かる[2]。本研究課題では、この有効ハミルトニアンの導出方法の研究を通して、スピン-フォノン間相互作用をもつ量子スピン系で実現するスピン一重項状態や臨界状態と、フラストレーションをもつ量子スピン系で実現する状態を関連付けて理解したい。本研究は、新たな視点で現象を捉え直し、一見別の現象を統一的に理解するという試みである。また、これら二つの系の関係の知識が蓄積されれば、量子モンテカルロ法の強力な手法を用いて、フラストレーション系の新奇な性質を議論できるようになると期待される。

3. 研究の方法

本研究では、スピン演算子とフォノン演算子からなる様々なスピン-フォノン間相互作用やスピン間相互作用を含む系において、フォノンの自由度をトレースアウトし、低エネルギー領域で有効なスピン演算子のみからなる有効ハミルトニアンを導出する方法を開発・発展させた。トレースアウトするためには、有効なユニタリー変換を見つける必要があるが、本研究では、スピン-フォノン間相互作用の強さとスピン間相互作用の強さで系統的に展開できる方法を見出した。さらに、限られた展開次数までであるが、フォノン数を保存した変換も見出し、有効なハミルトニアンを導出した。導出の際には、数式処理システムである Mathematica を用いた。また、スピン演算子からなる有効ハミルトニアンの解析には、ランチョス法などの厳密対角化手法やレベルスペクトロスコピー解析[3]を用いた。

4. 研究成果

様々なスピン-フォノン間相互作用をもつフォノン系の有効ハミルトニアンを導出する方法を進展させ、どのようなフラストレーション系に対応するのかを調べた。具体的には、(1) 幾何学的構造変化を考慮に入れたスピン-フォノン間相互作用がある一次元系、(2) フォノンによる鎖間相互作用がある高次元系、(3) 最近接・次近接スピン-フォノン間相互作用がある一次元系である。以下にそれぞれの詳細を説明する。

(1) スピン・パイエルス物質の性質を理論的に調べるときに用いられるスピン-フォノン間相互作用の形には二種類ある。一つは、磁性を担う原子自身の格子振動によりスピンとフォノン間に結合が生じる場合であり、TTF-CuBDT などの有機スピン・パイエルス物質の研究に用いられたものである。このスピン-フォノン間相互作用は 'difference coupling' や 'site phonon' と呼ばれている。もう一つは、無機のスピン・パイエルス物質である CuGeO_3 の研究に用いられるもので、'local coupling' や 'bond phonon' と呼ばれる。この場合、磁性を担う Cu 原子間の相互作用は、主に、O 原子や Ge 原子を介して生じており、スピン-フォノン間相互作用には O 原子や Ge 原子の格子振動の寄与が大きいと考えられている。実際の物質では、これら両方の種類の相互作用が存在し、物質の結晶構造などにより、その寄与する割合が異なっていると考えられる。本研究課題では、幾何学的構造変化をコントロールするパラメータを導入することにより、これら二種類のスピン-フォノン間相互作用両方をそのパラメータ領域に含む相互作用を提案した。このような幾何学的構造変化を考慮に入れたスピン-フォノン間相互作用と最近接と次近接のスピン間相互作用がある一次元系において、ハミルトニアンをユニタリー変換してスピン自由度のみを含む有効ハミルトニアンを導出する方法を進展させた。得られた有効ハミルトニアンは、スピン間相互作用の大きさ J とスピン-フォノン間相互作用の大きさ g で展開されており、原理的にはすべての次数の有効ハミルトニアンを導出できる。また、4次までの範囲内では、フォノン数を保存した有効ハミルトニアンを得るためのユニタリー変換を見つけた。4次までの有効ハミルトニアンは、5番目までの近接スピン間相互作用と四体相互作用を含むことが分かり、その系の基底状態と低励起状態のエネルギーをランチョス法などの厳密対角化法で計算した。さらに、得られたデータをレベルスペクトロスコーピー解析することにより、基底状態における相転移点を調べた。次近接スピン間相互作用の大きさをコントロールすることにより、 $g = 0$ の系の基底状態がスピン液体状態にある系とスピンギ

ャップ状態にある系の g 依存性を調べることができる。 $g = 0$ のときに、スピン液体状態にある系で g を大きくすると、従来から良く知られたスピンギャップ状態への相転移が起こる。一方、 $g = 0$ でスピンギャップ状態にある系では、スピン-フォノン間相互作用の幾何学的構造変化を表すパラメータ a に依っては、 g を大きくしたとき、スピン液体状態への相転移が起こることを発見した。この相転移の有無は、良く知られるフラストレーションのある反強磁性 J_1 - J_2 模型の基底状態における J_2/J_1 の相転移点と a の値の大小関係で決まっており、元のフォノン系と有効ハミルトニアン系のフラストレーション系との関係の知見を得る上で有意義な結果である。本研究の成果は論文にまとめて公表した。

(2) スピン・パイエルス物質 CuGeO_3 における鎖間相互作用の効果を調べることを視野に入れ、我々の有効ハミルトニアンを得る方法をフォノンによる鎖間相互作用のある高次元系に適用できるように拡張した。この方法では、サイト上のフォノン演算子を波数モードで表現することにより、この方法を二次元的、三次元的格子振動をもつ系にも適用可能とした。スピン-フォノン間相互作用の3次までの有効ハミルトニアンは、鎖内と鎖間のそれぞれの最近接と次近接相互作用、そして四体相互作用からなることが分かった。鎖内相互作用に関しては、格子振動の分散の鎖内方向成分を小さくすると鎖内のスピン間にフラストレーションが生じる。また、鎖間相互作用も反強磁性的であり、この相互作用によってもフラストレーションが生じることが分かった。鎖間相互作用の大きさが小さいとき、鎖内のスピンからなる系の基底状態がスピン液体状態からダイマー状態に相転移することが期待できる。そのように仮定して鎖内の最近接と次近接相互作用の大きさを比較し、どのような場合にその相転移が可能なのかを調べた結果、格子振動の分散の鎖間方向成分が大きいほど、相転移が実現するためには、スピン-フォノン間相互作用の大きさが大きくなければならないことが分かった。今後、フォノン系における量子モンテカルロ法の結果と比較することにより、有効ハミルトニアンの方法の有効性を確認したい。

(3) スピン-フォノン間相互作用として、最近接だけでなく次近接相互作用を考慮した一次元ハイゼンベルク型の量子模型を、我々の有効ハミルトニアンの方法で解析した。フォノンを古典的に扱った対応する模型の研究はすでになされており、基底状態においてダイマー秩序だけでなくテトラマー秩序も存在することが報告されている[4]。テトラマー秩序とは、三種類の近接ボンドが規則正しく並んだ秩序である。この秩序は次近接スビ

ン間相互作用が格子の自由度と結合しているために生じていると考えられ、格子の自由度を量子的に考慮したフォノン系でも実現することが期待されている。本研究課題では、我々の有効ハミルトニアンを導出する方法を拡張し、次近接スピン-フォノン間相互作用のある系に適用し、さらに、4次までの範囲内では、フォノン数を保存した有効ハミルトニアンを得た。4次までの有効ハミルトニアンは、6番目までの近接二体スピン間相互作用と四体相互作用からなる。このモデルの交換積分の大きさを解析することにより、量子フォノン系でも古典系と同様な基底状態相図が得られることを確認した。また、ランチョス法などの厳密対角法とレベルスペクトロスコーピー解析により、スピン液体状態とダイマー状態の相転移点を評価した。さらに、ボンド-ボンド間相関関数やその構造因子を厳密対角化法により数値的に調べることにより、テトラマー秩序の存在を示唆する結果を得ている。本研究の成果は、現在、論文にまとめているところである。

<引用文献>

[1] H. Suwa, "Geometrically Constructed Markov Chain Monte Carlo Study of Quantum Spin-phonon Complex Systems", Springer Theses (2014).

[2] S. Akiyama and C. Yasuda, "Quantum Phase Transition in Antiferromagnetic Heisenberg Chains Coupled to Phonons", J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 104709.

[3] K. Nomura and K. Okamoto, "Critical properties of $S = 1/2$ antiferromagnetic XXZ chain with next-nearest-neighbour interactions", J. Phys. A **27** (1994) 5773.

[4] F. Becca, F. Mila, and D. Poilblanc, "Tetramerization of a Frustrated Spin-1/2 Chain", Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 067202.

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1件)

C. Yasuda and S. Akiyama, "Quantum Phase Transition Induced by Geometrical Changes in Spin-Phonon Interaction", J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 014705. 査読有. DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.84.014705>

[学会発表](計3件)

安田千寿, 「近接・次近接スピン-フォノン間相互作用のある系におけるテトラマーの存在」日本物理学会 第71回年次大

会、2016年3月20日、東北学院大学(宮城県・仙台市)。

秋山聡, 「近接・次近接スピン-フォノン間相互作用のある系における量子相転移」日本物理学会 第70回年次大会、2015年3月21日、早稲田大学(東京都・新宿区)。

安田千寿, 「スピンパイエルス系におけるスピン液体相への量子相転移」日本物理学会 第69回年次大会、2014年3月28日、東海大学(神奈川県・平塚市)。

[その他]

ホームページ等

<http://www.phys.u-ryukyu.ac.jp/~cyasuda/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

安田 千寿 (YASUDA, Chitoshi)

琉球大学・理学部・准教授

研究者番号：20398564

(2)研究分担者

秋山 聡 (AKIYAMA, Satoru)

和歌山工業高等専門学校・総合教育科・教授

研究者番号：10256662