

## 論文の内容の要旨

### Theory of Orthogonal Dimer Heisenberg Spin System for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$

#### $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ に対する直交ダイマー・ハイゼンベルグスピン系の理論

宮原 慎

銅酸化物高温超伝導において擬ギャップが発見されて以来、低次元スピンギャップ系は盛んに研究が行なわれている分野の一つである。中でも 2 次元スピンギャップ系は、多くの研究者の注目をあつめており、これまでも  $\text{CaV}_4\text{O}_9$  といった物質が盛んに研究されてきている。

最近、陰山らによって  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  がスピンギャップ系物質の一つであることがしめされた。この物質は、 $S = 1/2$  の 2 次元系物質であると考えられ、スピンギャップの大きさは約 35K と見積もられている。さらに、磁化過程において飽和磁化の  $1/3$ ,  $1/4$  と  $1/8$  に磁化プラトーが観測されている。本研究ではこの系の磁氣的性質を理論的な観点から調べた。

低温における  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  の磁氣的特徴は図 (1) のような 2 次元スピン  $1/2$  ハイゼンベルグ模型でよく説明される。ここで  $J$  が最近接相互作用を  $J'$  が次近接相互作用をそれぞれ表す。このモデルは  $J = 0$  の極限では 2 次元正方格子と等価なモデルとなる。

この模型では  $J$  ボンド上でダイマー一重項状態をとる

$$|\Psi\rangle = \prod_a \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle_a - |\downarrow\uparrow\rangle_a) \quad (1)$$

で表せる状態が固有状態となることが Shastry と Sutherland によってしめされている。このような固有状態が実現する上で、隣合うダイマー同士が直交していることが重要な役割を果たしている。 $J'/J \ll 1$  の極限では式 (1) の固有状態が基底状態になることは明らかである。この系では量子相転移点  $(J'/J)_c = 0.69(1)$  が存在し、式 (1) は量子相転移点  $(J'/J)_c$  より小さい領域では基底状態となる (ダイマー一重項相)。一方、臨界点より大きい  $J'/J$  の領域では Néel 状態が基底状態であると考えられる。3 次元性まで含めた  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  格子の場合においても面間相互作用が  $J$  と比べて充分小さい領域では、式 (1) が基底状態になっていることが分かった。このことは、この物質で 2 次元性がよく成り立っている原因の一つとなっている。面間相互作用の大きさまで考慮に入れ、スピンギャップの大きさと帯磁率の温度依存性より  $J$  と  $J'$  を見積もると、 $J = 85\text{K}$  と  $J' = 54\text{K}$  が得られる。こ

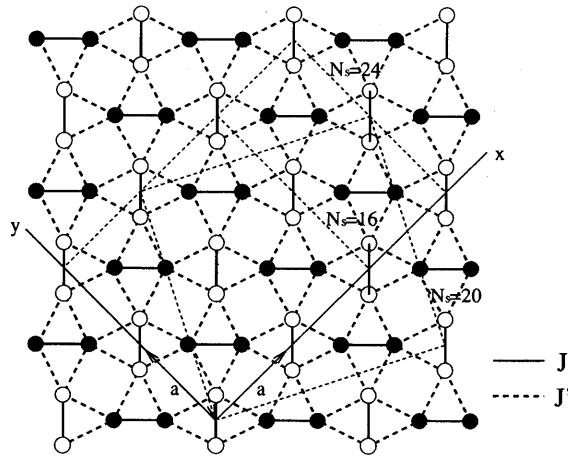


図 1: 2次元直交ダイマー-ハイゼンベルグ模型. 最近接相互作用  $J$  を実線で, 次近接相互作用  $J'$  を破線で表している.

これらの値はこの物質が量子相転移点に近いことを表している. 上記のパラメータを用いることで, 比熱や中性子の実験結果をよく再現することができる.

図(1)の2次元モデルにおけるダイマー-三重項に対する特徴の一つに三重項の最励起状態の局在性の強さがある. 基底状態同様, この性質が成り立つ上でもダイマーボンドの直交性が重要な役割を果たしている.  $J'/J \ll 1$  の極限からの摂動計算の結果  $J'/J$  の5次まではトリプレット励起が完全に局在していることがわかる. こうした局在性の強さは, ほとんど水平な分散関係として中性子実験で実際に観測されており, 中性子の結果は厳密対角化や摂動計算でよく説明できる. 中性子や ESR などの実験では, 第一励起状態よりも高エネルギー領域に分散関係の幅が広い励起が観測されている. この系では, 2つの三重項励起の束縛状態が安定な状態として存在する. 束縛状態では, 2つの三重項励起が隣合うことで1つの励起がある場合に比べて三重項励起が移動がしやすくなる (correlated hoppings). 中性子で観測されている分散の幅の広い励起も, このような束縛状態を考えることで説明することができる.

三重項励起状態の局在性は, 磁化過程に見られる磁化プラトーを考える上でも重要な役割を果たす. この系では, 三重項励起状態の局在性のため, 三重項励起の結晶化が起こる. この結晶化状態がエネルギー的に安定となる磁化で磁化プラトーが出現する. そのような安定状態は三重項励起間の相互作用が等方的であるとすればユニットセルが正方形をとるときに実現すると考えられる. その時の各ユニットセルのスピンの数は  $N = 4, 8, 16, 20, 32, \dots$  であり, それぞれ  $1/2, 1/4, 1/8, 1/10, 1/16, \dots$  のプラトーの原因となると考えられる. 実際に観測されている磁化プラトーはこのうちの  $1/4, 1/8$  に当たる. ところが, 三重項励起間の相互作用を摂動計算でもとめると, 三重項励起間の相互作用には方向依存性があることがわかった. そのため  $1/4$  の磁化プラトーでのスピン状態は上記のような正方形のユニットセルとは異なるストライプの構造をとることで安定となる. こうした方向依存性により, 上記の正方形のユニットセルからは発生しないと考えられていた  $1/3$  の磁化にもプラトーが存在することが分かった.  $1/3$  のプラトーでも, 三重項励起のストライプ構造が示唆されている. 実際に, 理論予測の後に行なわれた実験において, この  $1/3$  プラトーが観測されている.  $1/4$  と  $1/3$  以外の磁化では, 等方的な相互作用から予測されていた正方形のユニットセルが実現していると考えられる.