

論文審査の結果の要旨

氏名 山下 靖文

量子スピン系において、スピン間相互作用により長距離秩序が生じることが多くあるが、結晶構造や相互作用の符号や大きさによっては、すべてのエネルギー利得を満足させるようなスピン配置が決まらない場合がある。これをフラストレーションと呼んでいる。実際、いくつかの物質においてフラストレーションが生じていると考えられており、その結果として興味深い量子現象が現れると思われている。

このようなフラストレーションしたスピン系に対する理論としては、古典的なスピンに対する研究が行われてきているが、量子スピン系の場合には理論的な取り扱いが数値計算を含めて難しい。最近、長距離秩序を持たない量子スピン系の基底状態の1つの可能性として、valence bond solid (VBS) という状態が提唱されており、非常に興味を持たれている。この状態は、すべてのスピンが隣接のスピンと対をつくり、その2つのスピンが一重項を形成した状態である。この場合、明らかに長距離秩序は存在せず、励起スペクトルにギャップがあると予想される。

本研究では、このような VBS 状態が3次元的にフラストレーションを持つパイロクロア格子上的スピン1の量子スピン系において実現するのではないかとすることを議論した。さらにこの考え方によって、 ZnV_2O_4 という物質の相転移が理解できるのではないかとすることを指摘した。

本論文の第一章は序、第二章では ZnV_2O_4 に関する実験結果をまとめている。 ZnV_2O_4 は実際にはスピネル型の結晶構造を持つが、磁性を担う V^{3+} イオンは頂点を共有した正四面体のネットワーク、つまりパイロクロア格子を形成している。また V^{3+} イオンはスピン1を持ち、相互作用は反強磁性的であるのでフラストレーションを生じている。

次の第三章からが本研究で調べた理論の結果である。まず、1次元スピン系の場合に導入された VBS 状態をパイロクロア格子上的スピンモデルに対して拡張し、1次元との類推から VBS 状態が基底状態となるような新たなハミルトニアンを導いた。その結果、基底状態に巨視的な量の縮退が存在するような場合があることを示した。次に第四、五章においては、上記の縮退を解くというメカニズムを (1) 格子変形を伴うものと、(2) 長距離スピン間の相互作用によるもの、の2つの場合についてそれぞれ調べた。(1) では、まずスピン・格子間の相互作用を群論的な解析によって絞り込み、どのような格子変形が安

定化するかを調べた。その結果は、 ZnV_2O_4 で見出されている格子変形を伴う相転移と矛盾しないことがわかった。また (2) については、まず長距離スピン間相互作用を摂動として扱い、隣接正四面体間の有効相互作用を導いた。その結果を用いると、自由エネルギーを秩序変数で展開した場合に 3 次の異方性が生じて、(1) のスピン秩序と同じ形での相転移が起こることが示された。

この結果に基づき第六章では ZnV_2O_4 の実験結果との比較を行ない、上記のメカニズムによって相転移が説明できる可能性を議論した。第七章はまとめと将来の課題に当てられている。

以上のように本研究では、パイロクロア格子というフラストレーションのある 3 次元量子スピン系において、VBS 状態という新たな量子状態が実現する可能性を見出した。これをもとに、実験を説明できる可能性があるということを示した。ただし、実験的には (1) 帯磁率が低温に行くに従い上昇する、(2) 上記の相転移よりも低温で、反強磁性への相転移が起こることが分かっており、これらについて完全に理論的な説明ができたわけではない。そのため、別のメカニズムによる相転移である可能性を否定できない。このように、本研究で見出された新しいメカニズムが真のものであるかについては今後の研究を待たなければならないが、1 つの新しい可能性を示したという点が評価できる。また理論的興味として、フラストレーションによる VBS 状態の出現とくに基底状態の巨視的な量の縮退という観点は、大変興味深いと思われる。

本論文の内容の一部は、英文雑誌に掲載済である。また本研究は上田和夫教授・Manfred Sigrist 教授との共同研究であるが、論文提出者は本質的な寄与をしていると認められる。以上をもって審査員一同は、本論文が博士 (理学) の学位を授与するにふさわしいものであると認定した。