

## 審査の結果の要旨

氏名 田中 克大

量子スピン系で見出されるスピンネマティック相は、局在スピン自由度が成す四極子秩序の一種であり、2000年代初頭に盛んに研究された。中でもスピン1のbilinear-biquadratic(BLBQ)モデルやフラストレートしたスピン1/2の $J_1J_2$ -Kモデルは、その典型的な舞台として知られている。前者のモデルの四極子モーメントは単一のスピン1がbiquadratic(BQ)相互作用により揺らいで向きを失って生じたものである。一方、後者のモデルの四極子モーメントは、二つのスピン1/2が成す有効スピン1によって作られたもので、その秩序は2つのマグノン(強磁性相の励起)の束縛状態が量子凝縮した状態として理解される。しかし、前者の系は実際の物質上での実現が困難で、後者の系も強磁場下フラストレート系での四極子観測という難題を抱えている。物質探索の幅を広げるために、上記のような各論的理解を超え、両者の系をより統一的な視点から理解することが求められている。

本論文では、上記2つの系を繋げる舞台としてスピンドイマーモデルに着目した。ダイマー系の四極子秩序を、スピンドイマーが成すスピン1で表現すると前者のモデルに、スピンドイマーを1/2に分解して理解すると後者のモデルに帰着する。またダイマーが内部自由度を持つために、より多様な四極子秩序が発現する可能性が生まれる。

このような視点から、本論文の第2-5章でそれぞれ異なった理論手法を用いた解析と議論を行い、総合的にスピン四極子相の理解を前進させた。第2章ではスピン1のBQモデルにおける比熱の特徴的な磁場依存性の発見、第3章ではスピン1ダイマーにおける新たな四極子相の発見、第4章ではスピン1/2ダイマー系における有効的なBQ相互作用のミクロスコピックな摂動論からの評価、第5章では強磁場スピン1/2ラダー系のネマティック相のダイマー基底による再記述を行った。

まず第2章では、強的(ferro)ネマティック秩序相を基底状態にもつスピン1のBQモデルにおいて、四極子の方位を表すdirectorという複素ベクトルに対する半古典的なモンテカルロ計算を行った。その結果、比熱の温度依存性に、directorの集団的な秩序化へ向けた揺らぎの増大を示すピーク構造が現れた。このピーク位置は、弱磁場の印加で、いったん高温側に上昇した後、低温側にシフトするリエントラント現象を示す。この現象は、四極子ゆらぎが磁場に対して安定であることに由来するエントロピー効果(Pomeranchuk効果)によるものであることが示されている。本結果は、四極子相の、典型的な磁気秩序相とは異なる新たな一面を明らかにするとともに、実験でネマティック相を熱力学特性から捉えるための手掛かりとなりうる。

第3章では、2つのスピン1が反強磁性相互作用で強く結びついたダイマーを構造単位とするモデルを扱った。この系は1ダイマーあたり9自由度からなる量子多体系であるため、取り扱いに工夫を要する。そこでダイマーの低エネルギー自由度としてス

ピン1のボソンの有効模型を摂動論的に導出し、厳密対角化をもとにした数値解析を行った。その結果、従来型のスピネマティック相に以外に、ピン1のボソンがなす2つの四極子相を新たに捉えた。そのうちの強的四極子-p-ネマティック相は、ピン1が四極子の三倍周期秩序に加え、pベクトルという内部自由度が秩序をなしており、既存の系にはない相である。この相は、Ru 化合物で最近スピンスングレット相近傍に見出されている非磁性相を表すものではないかと示唆される。

第4章では、スピンドイマー系において、低エネルギー状態を支配するピン1のボソン間に働くBQ相互作用を、ミクロスコピックな計算により評価した。ピン1/2ダイマー格子のハバード模型において、クーロン相互作用の強い極限から出発し、電子の遷移積分 $t$ の摂動を4次まで評価した。4次で生じるピン1/2の4体リング交換相互作用から、ピン1間のBQ相互作用の値を導出し、ハイゼンベルグ(BL)相互作用と比較したところ、両者がほぼ同じオーダーの値を取りうることを示した。つまり、BQ相互作用はBL相互作用に比べて数桁小さいとする従来の直感的な理解が、ダイマー系では必ずしも成り立たないことを明示している。

第5章では、ピン1/2の梯子模型をダイマーの1次元模型とみなし、強磁場下のピン完全偏極状態からの2マグノン( $\Delta S_z = -2$ )励起を、ダイマー基底を用いて解析した。2マグノン束縛状態を、ピン1ボソンで表現することによって、相互作用の符号や格子の幾何学的構造が、実際にスピネマティック状態の発現とどう系統的に関連付けられるかを考察した。その結果をもとに無磁場のダイマー系や正方格子系におけるスピネマティック相との関連を議論して今後の展望に繋げている。

以上のように本論文の骨子は、ピン1ダイマー系において、ダイマー内自由度の存在によって多様な四極子相が発現することを示したこと、強的四極子相が比熱のピークの磁場リエントラント効果で特徴づけられるという発見、BQ相互作用の起源を掘り下げて四極子秩序の発現要因に対する系統的理解をもたらしたこと、にある。これらは、ピン四極子秩序という物理現象を複数の側面から総合的に明らかにした仕事として質実剛健にまとめられた。なお本論文の主要な部分である第2章と第3章は、堀田知佐氏との共著で Phys. Rev. B 誌に出版済みであり、第4章は堀田氏に加え横山祐人氏と共著で J.Phys. Soc. Jpn. 誌に掲載済みであるが、3編とも論文提出者が主著者として主たる立案、および計算をすべて行い、主たる寄与をしたと認められる。この評価のもと、論文審査委員会は全員一致で博士(学術)の学位授与が適当であると認めた。