

# 低次元量子スピンラダーND<sub>4</sub>CuCl<sub>3</sub>のCu—NMRの角度依存性(解析)

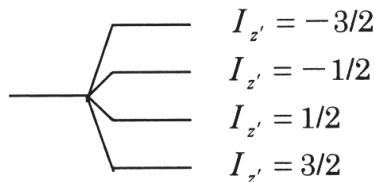
後藤研究室 A9674048 鹿討直仁

## 【はじめに】

ND<sub>4</sub>CuCl<sub>3</sub>という物質はCuの3-dスピンの2本足の梯子上に並んだ物質で、低温で磁化曲線にプラトー領域(約5Tから12T)をもつ。我々は、東北大学の金属材料研究所において、その梯子上の電子のスピンの状態を調べるため、低温(4.2K)で高磁場(2.4T~5.8T)と低磁場(1.2T~1.7T)で各々、角度を変えながら、CuのNMR磁場掃引スペクトルをスピンエコー法で測定した。

## 【NMRの原理】

ゼーマン分裂の場合ハミルトニアンHは  $H = -\gamma\hbar H_0 I_{z'}$  (外部磁場の方向をz'とする)となり、Cu核の場合スピンは3/2なのでエネルギー準位は下の図のようになる。



$$H_0 = 0 \quad H_0 \neq 0$$

NMRでは、磁場に垂直な向きの交流磁場  $H_1 I_x e^{i\omega t}$  を加え、これらの準位間に、 $\Delta I_{z'} = 1$ となる遷移を引き起こす。結晶内の核は核四重極相互作用(核の電気四重極モーメントが周りのイオンやオンサイトの電子が作る電場勾配とする相互作用)や超微細相互作用(周りの電子の軌道やスピンの作る磁場  $A\vec{S}$  と核  $\vec{I}$  との相互作用)をしているので、準位間隔は等しくなくなり、Cu<sub>63</sub>とCu<sub>65</sub>の各同位体ごとに信号は3本見られる。信号の現れる共鳴磁場から結晶内の原子核の感じている電場勾配や、超微細場の情報などを得ることができる。

## 【測定結果と解析】

スペクトル位置が角度依存する原因として、四重極の効果(下の式で第3項)、超微細相互作用(第2項)の異方性、及び電子スピンの作る磁場が考えられる。それらを含んだハミルトニアンHは

$$H = -\gamma\hbar H_0 I_{z'} + \vec{I} A \vec{S} + (v_Q/6) \{3I_{z'}^2 - I(I+1) + \eta(I_x^2 - I_y^2)\}$$

となる。(z'軸は外部磁場の方向、x、y、z軸は電場勾配テンソルの主軸。v<sub>Q</sub>は四重極相互作用の大きさ、ηは電場勾配の非対称性パラメーター)これを対角化した場合、 $| -3/2 \rangle, | -1/2 \rangle, | 1/2 \rangle, | 3/2 \rangle$ の4準位の波動関数が混ざり全ての遷移(6本)が起こりうる。

低磁場でも高磁場でも各同位体ごとに2組(全部で4本)の強い信号を確認した。高磁場においては角度によっては弱い信号を更に2組みることでもできた。グラフは強い2組の信号のピーク位置を角度の関数としてプロットしたものである。グラフからわかるようにスペクトルは180度周期になっている。これは電子のスピンの方向が結晶内で固定されていないことを示している。

強い2組の信号は2個の電子がsingletを組んでいるサイトのもので、弱い信号がtripletサイトからのものと考えている。また、6本の遷移のうち2本しか見えなかったのは、遷移行列要素が0になるような波動関数の混ざり合いがおきたからと考えている。現在、ハミルトニアンを対角化して実験結果に合うように、パラメーターv<sub>Q</sub>、η、Aを決定しようと試みている。

