

25. 六方晶上の Ising-like Heisenberg 反強磁性体の相転移と中間相の性質

京大・教養 宮下精二

三角格子反強磁性体はその競合する相互作用のために種々の興味深い振舞いを示すことが報告されてきている。特にイジング、あるいはイジング性の強い軸性異方性を持つ場合には対応する物質も多くその相転移のあり方や各相の特徴に興味を持たれている。しかし各相、特に中間相でのスピン配位は未だに多くの議論があるところである。今回の報告では、二、三次元でこれらに対応するモデルの性質を比較する。

§ 1 模型

$$\begin{aligned} \text{二次元イジング系 (2DAFTI)}: \quad & \sigma = \pm 1 \\ & = J \sum \langle ij \rangle \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum \langle il \rangle \sigma_i \sigma_l \end{aligned}$$

ここで  $\langle ij \rangle$ 、 $\langle il \rangle$  はそれぞれ面内の三角格子の最近接対、及び次近接対を意味する (図1)。

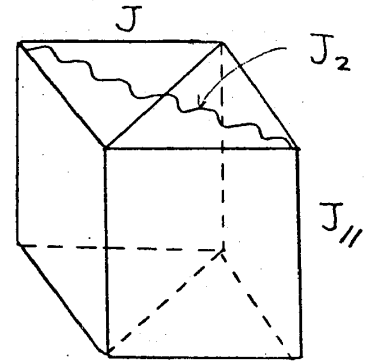


図1

三次元イジング系 (3DAFTI)

$$= J \sum \langle ij \rangle \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum \langle il \rangle \sigma_i \sigma_l + J_{//} \sum \langle ik \rangle \sigma_i \sigma_k$$

ここで  $\langle ik \rangle$  は面間の相互作用である (図1)。

二次元イジング的ハイゼンベルグ系 (2DAFTIHA):  $S = 1$

$$2DIHA = J_{xy} \sum \langle ij \rangle (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_z \sum \langle ij \rangle S_i^z S_j^z \quad (2DAFTIHA)$$

$$2DIHD = J \sum \langle ij \rangle S_i \cdot S_j - D \sum_i (S_i^z)^2 \quad (2DAFTIHA)$$

同様にして三次元系も定義される。(3DAFTIHA, 3DAFTIHD)

三次元では3DAFTIHAは  $J_{xy}$  と  $J_{xy}^{//}$  の比などパラメタが多く曖昧になるのでDタイプを考える ( $D = 0.9J$ )。

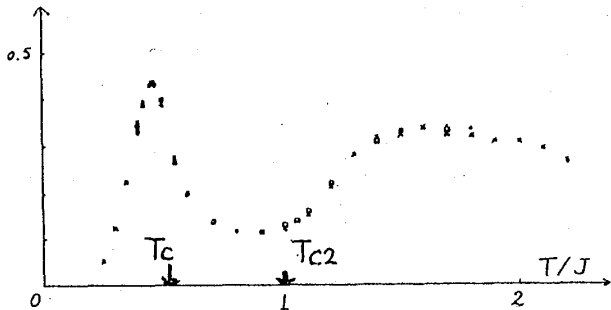
§ 2 比熱

各々の系の比熱の概形を図2に示す。そこでわかるように各々のモデルは2つの逐次相転移を示しているように見える。二次元の場合は各相転移はKosterlitz-Thouless転移と同じタイプのもと考えられ発散はない。またそのピーク的位置は相転移温度に対応していない。図中に転移点と考えられる温度を矢印で示す ( $T_{c1}$   $T_{c2}$ )。三次元のAFTI模型は1つのシャープな発散(あるいはピーク)と非常に広がったピークを示している。低温側の転移点及びその相転移の性質は

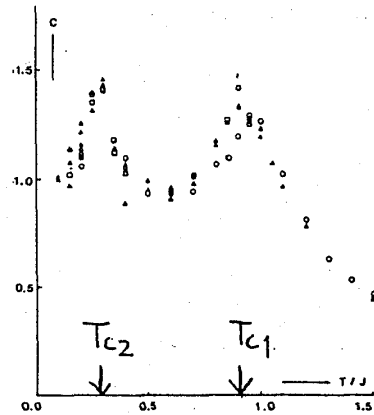
現在も議論されている。3DAFTIHDでは2つのシャープな発散が見られ、それぞれz成分、xy成分の秩序化に伴うものであることがわかっている。このように3DAFTIHDでは転移点も簡単に特定でき、相の性質の違いも明かであるが、中間相のスピンの決定は3DAFTIの場合と同様に困難がある。この点について以下で述べる。

図2

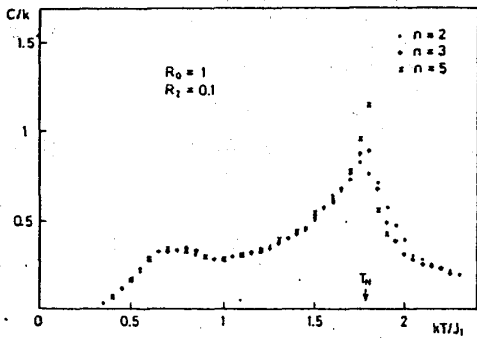
2DAFTI



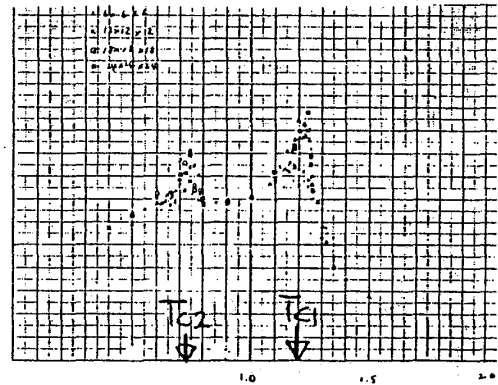
2DAFTIHA



3DAFTI



3DAFTIHD



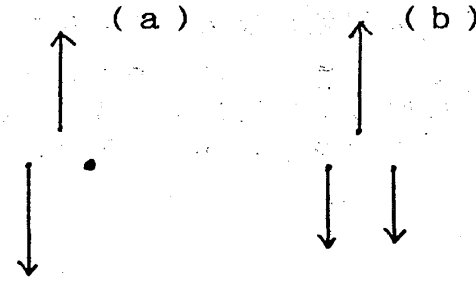
### § 3 スピン配位

3DAFTIHDの基底状態は図3に示すようなz軸を含む平面内にある少し歪んだ $120^\circ$ 構造である。これが低温での配位であることはまちがいないがz成分の中間相における配位として図4にあげる2つが考えられる。図4(a)は一つの副格子がdisorderなのでPD (partially disordered) 相と呼び、図4(b)はFR (ferri) 相と呼ばれている。これら2つのモードはそれぞれ6通りの実現の仕方があるが二次元系での中間相ではそれを特定しない Kosterlitz-Thouless 相であると考えられておりスピンの決定は必要なかった。しかし三次元系では次元性から考えても各相で長距離秩序を持つと考えるのが自然である。それがどのようなものかを決めなくてはならないがモンテカルロのスナップショットからそれを決めようとする観測時間内に配位間での飛び移りがおこるとい困難がある。そこで中間相の秩序状態の性質を調べるために以下の解析を行なった。

図3



図4



まず、長距離秩序であることを確認するために副格子磁化  $M_A^z$ ,  $M_B^z$ ,  $M_C^z$  のサイズ依存性を調べる。

$$\langle A \rangle = \langle M_A^z \rangle + \langle M_B^z \rangle + \langle M_C^z \rangle$$

の  $T = 0.9J$  での値を系の一辺の長さ  $L$  ( $L^3 = N$ ) に対して対数プロットすると傾きは3となり長距離秩序となっていることがわかる。また  $\langle A \rangle / N^2$  を  $1/L$  に対してプロットすると直線的な依存性が見られた。これは秩序変数のゆらぎが発散していることを意味する。この事情は三次元の強磁性 XY 模型 (3DXY) の場合と同じである。

このようにして長距離秩序があることがわかったがその配位を見ると上で述べたように移り変わりが起こる (図5)。これが sublattice switching と呼ばれてきたように系の熱力学的性質として本質的なものか、あるいは有限サイズ効果なのかは議論のわかれるところである。そこで今の場合と同様にゆらぎが発散している 3DXY の磁化の MCS 依存性を調べてみる。3DXY が長距離秩序を持つことは明かであるが磁化の変化は相当大きいことがわかる (図6)。図5中に藤木らによる AFT の配位の XY 模型への変換による表示したが、そこでみられるゆらぎの様子は 3DXY の場合を参考にすると有限サイズ効果であると考えられることは十分容認される。熱力学的極限で残る配位が PD なのか FR なのかは決まらないがこの2つのちがいを与えるものとして一様磁化  $M_z$  を調べた。

中間相でのサイズ依存性をみると  $\langle M_z^2 \rangle$  は  $N^2$  に比例することがわかった。これより中間相の配位としては FR が妥当であると思われる。この相の詳しい性質は現在研究中である。

図 5

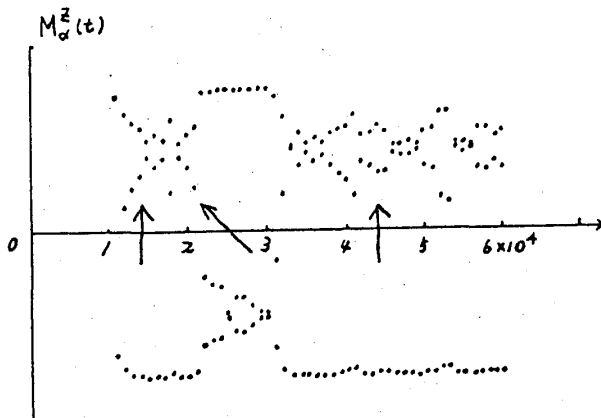
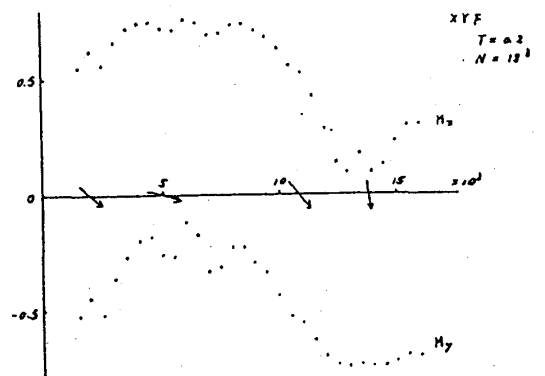


図 6



#### § 4 議論

今の場合  $T_{c2}$  の相転移は  $z$  成分の配位に関係なく  $x, y$  成分の秩序かであるが  $z$  成分に関してもう一度相転移が考えられる。この模型の基底状態は図1に示したように  $z$  成分に関しては安定な、つまり励起にギャップがありゆらぎが有限な状態であることがわかっている。このため § 3 でみたいわゆる相関距離の発散した (

massless) 相は低温で相関距離が有限の相へ移り変わることが考えられる。つまり

$$T_{c1} > T > T_{c3} : \langle \delta S_i^z \delta S_j^z \rangle \sim 1 / r_{ij}$$

$$T_{c3} > T : \langle \delta S_i^z \delta S_j^z \rangle \sim 1 / r_{ij} \exp(-r_{ij}/\xi)$$

この  $T_{c3}$  は 3DAFTI に関して上野ら<sup>5)</sup> の界面エネルギーの研究によって見いだされているものと同じものと考えられる。しかしもしこのような変化が起こればそれはバルクの性質の変化であり  $T_{c3}$  は熱力学的な相転移点である。

この転移点の上下での系の性質を考察してみよう。  $T_{c1} > T > T_{c3}$  ではスピン配位は  $\nabla^2 \theta = 0$  で与えられ境界条件や不純物の効果は長距離に及ぶ。たとえば同じ副格子上のある2つの格子点 AB 上のスピンをそれぞれ上下に固定するとその間のスピンは大域的に乱される。それに対し  $T < T_{c3}$  ではある基底状態の配位からの乱れは局在化し不純物の効果は重要でなくなる。この考察は 3DAFTI での松原・猪苗代<sup>6)</sup> の結論と全く反対であるが不純物に敏感な中間相がそのままクエンチされてしまうと考えれば彼らのデータと今の考察は必ずしも矛盾しないと思われる。この  $T_{c3}$  の性質に関しては三次元クロック模型の相転移の研究などを通して明かにされるであろう。

#### 参考文献

- 1) S. Miyashita, H. Kitatani and Y. Kanada: 準備中
- 2) S. Miyashita and H. Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3385.
- 3) F. Matsubara and Inawashiro: J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 4373,  
56 (1987) 2666.
- 4) S. Miyashita: 準備中
- 5) Y. Ueno: 私信
- 6) F. Matsubara and Inawashiro: J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 622.