

スピナイス系における磁場中相転移

北海道大学 大学院理学研究科 根本 幸児,¹ 山梨 顕友

1 はじめに

パイロクロア格子の磁性体の中には、結晶場による異方性ゆえに完全フラストレートしたイジングスピン系とみなせる物質がある。このような系をスピナイス系というが、この系では基底状態が巨視的に縮退し残留エントロピーが存在する。一般には外部磁場をかけるとその縮退が完全に解けスピン配位がひとつ定まるのが普通であるが、ある特殊な向きに磁場をかけると縮退が完全には解けず、エントロピーは磁場の強さに対して奇妙な振舞を示す。本報告ではそのメカニズムを概説する。

2 スピン模型

パイロクロア格子は頂点で接合した正四面体がダイヤモンド格子を組んでいるような形状（ダイヤモンド格子のライングラフ）である。そこで、各々の正四面体の各頂点にハイゼンベルクスピンがのっているスピン模型を考える。それぞれ頂点と四面体の中心を結ぶ線の向きに強い異方性があり、スピン間には強磁性的な最近接相互作用のみがあるとき、ひとつの正四面体上の4つのスピンのエネルギーは外部磁場がないときには

$$E_0 = -3J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) - D\{(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{n}_1)^2 + (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{n}_2)^2 + (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{n}_3)^2 + (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{n}_4)^2\} \quad (1)$$

と表される。ここで \mathbf{n}_i は4種類の副格子のそれぞれに定められた異方性の方向を表し、互いの向きは $\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j = (4\delta_{ij} - 1)/3$ となるようにとることができる。異方性の強さ D が大きい極限を考えると、イジング変数 $\sigma = \pm 1$ を用いてスピンを $\mathbf{S}_i = \sigma_i \mathbf{n}_i$ と表せば、

$$E_0 = +J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_1\sigma_3 + \sigma_1\sigma_4 + \sigma_2\sigma_4 + \sigma_3\sigma_4) \quad (2)$$

という反強磁性相互作用のあるイジングスピンのエネルギーとなり、こうして完全にフラストレートしたイジング系とみなすことができることがわかる。

このエネルギーを書き換えると

$$E_0 = +\frac{J}{2}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)^2 - 2J \quad (3)$$

¹ E-mail: nemoto@statphys.sci.hokudai.ac.jp

となるので、2つずつのスピンのそれぞれ $+1, -1$ になっているときが基底状態であり、このような6個の状態を”2-in 2-out”配位ということがある。各々のスピンのふたつの正四面体に属しているという制限と考えあわせると、これはまさに氷の結晶中で水分子が6状態の配向をとれるが分子間の水素結合にちょうどひとつだけ陽子が存在するという制限がある状況（アイスルール）と等価なので、この系をスピンアイス系と呼んでいる。アイスルールのもとでは全系の基底状態が巨視的に縮退していることがよく知られており、その残留エントロピーは実験的にもまたシミュレーションでも観測されてその値は氷のそれとよい一致を示している [1][2]。

3 外部磁場の効果とカゴメ格子

外部磁場を4つの副格子のひとつの異方性の向き、たとえば4番目の副格子の容易軸に沿った $-n_4$ の向きにかけると（すなわち $\mathbf{H} = -H\mathbf{n}_4$ の磁場をかける）。このとき、上で示した E_0 にゼーマンエネルギー $-S_i \cdot \mathbf{H}$ を加えれば、1番目の副格子上のあるイジングスピン σ_1 が関与するエネルギーは

$$E = +J\sigma_1(\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4 + \sigma'_2 + \sigma'_3 + \sigma'_4) - \frac{H}{3}\sigma_1 \quad (4)$$

となる（ひとつのスピンはふたつの正四面体に属することに注意）。2番目と3番目の副格子についても同様であるが、4番目の副格子上のスピンは他よりも直接的に磁場を感じる（方向余弦が -1 ）ので十分低温では $\sigma_4 = \sigma'_4 = -1$ に固定されていると仮定してもよい。そうすれば上のエネルギーは

$$E = +J\sigma_1(\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma'_2 + \sigma'_3) - (2J + \frac{H}{3})\sigma_1 \quad (5)$$

となり、4番目の副格子を抜いて $h_{\text{eff}} = 2J + \frac{H}{3}$ という磁場をかけた反強磁性イジング模型に等価である。ところがパイロクロア格子で4番目の副格子を消すと n_4 に垂直な平面上のカゴメ格子が独立に積層した格子となるから、この外部磁場によってカゴメ格子上の完全フラストレーション系とみなせるイジングスピン系が現れることになる。カゴメ格子の研究は古くから研究されておりその残留エントロピーの値も評価されているが [3]、磁場中のパイロクロア格子でそれが実験的に観測される可能性があるということは興味深い。

以上、磁場中のスピンアイス系が様々な残留エントロピーをもつメカニズムをみてきた。この系では有限温度で磁場中一次転移が起こる可能性も指摘されており、また磁気双極子相互作用を考慮したときの振舞もそれほど明らかではないので、今後の研究が注目されている。

参考文献

- [1] M.J.Harris *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**(1998) 4496.
- [2] B.C. den Hertog and M.J.P.Gingras, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 3430.
- [3] K.Kanô and S Naya, Prog. Theor. Phys. **10** (1953) 158.