

かごめ格子反強磁性イジング的異方性を持つ ハイゼンベルグモデルの相転移

摂南大学・工 渡会征三
東京大学・工 宮下精二

かごめ格子は三角形が頂点を共有してつながっている (corner sharing) ため、その上での反強磁性体を考えたとき基底状態が局所的な縮退を持ち、絶対零度でも長距離秩序が生じない。その様子を図 1 (a) に示す。同様な局所的縮退は、連続スピン系であるハイゼンベルグ系や XY 系でも起こり (図 1 (b))、そのため、極めて相転移が起こりにくい系として知られている。

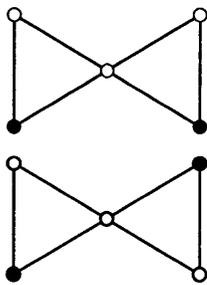


図 1 (a)

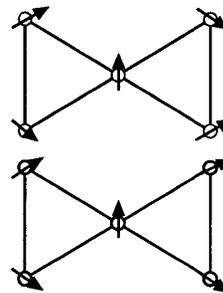


図 1 (b)

このような系での相転移の機構として、この系がイジング的異方性をもつハイゼンベルグスピンからなるとき

$$\mathcal{H} = J \sum_{ij} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + A S_i^z S_j^z], \quad A > 1 \quad (1)$$

このモデルは奇妙な性質をもつ強磁性相転移を示すことが、黒田・宮下によって示されている。[1] ここでは、マクロな縮退の持つ低温相が発見され、その縮退を反映した自由度として風見鶏変換が重要な役割をした。そこでの相転移のユニバーサリティクラスは二次元の強磁性イジングモデルと一致することが調べられている。

今回の発表では、その機構が三次元の格子の場合にどのように働くかを調べ、基本的な考え方は二次元と同じであるが、相転移の特異性は単純に三次元イジングモデルのそれらとは異なることがわかった。

二次元系での相転移 [1]

このモデルでは、各三角形でのスピン配位は図 2 に示すような、 z 軸を含む面内にある少しゆがんだ 120° 構造である。図ではスピンが作る面を xz 面にとっている。ここでの角度 θ は

$$\cos \theta = \frac{A}{A+1} \quad (2)$$

で与えられる。いま、 z 軸に平行なスピンは上向か、下向かにとってよく、それらは異なる基底状態を与え、縮退している。

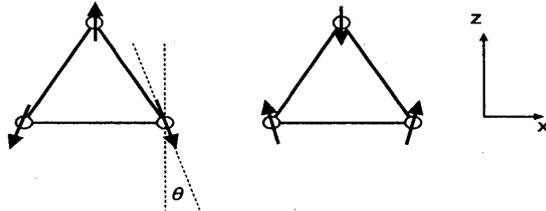


図 2

この場合もかごめ独特の局所的な縮退は残り、基底状態はマクロに縮退している。しかし、この系で重要なのは上で述べた z 軸に平行なスピンの上向か、下向かに関する縮退は基底状態で破れることである。つまり、ある一つの三角形で z 軸に平行なスピンの上向かであれば、隣の三角形でも z 軸に平行なスピンは上向かではなくてはならないからである (図 3)。各三角形では、スピンの 120° 構造から少しゆがんでいるため、磁化の合計は 0 にならない。

$$m_\uparrow = 1 - 2 \cos \theta = 1 - 2 \frac{A}{A+1} = -\frac{A-1}{A+1} \quad \text{or} \quad m_\downarrow = -m_\uparrow \quad (3)$$

であるので、基底状態では磁化が出現している。この対称性の破れのため、有限温度で一様磁化が自発的に出現する相転移が存在する。その相転移のユニバーサリティクラスは二次元の強磁性イジング模型のものと同じであることも調べられている。

つまり、かごめ格子反強磁性体はスピンの ± 1 をとるイジングスピンの場合も XY、ハイゼンベルグ模型の場合も相転移を示さないが、イジング異方性をもつハイゼンベルグ模型では一様磁化に関する相転移が起こるのである。図 4 に自発磁化の温度変化に相当する

$$m^2 = \frac{\langle M^2 \rangle}{N^2}, \quad M = \sum_i^N S_i^z \quad (4)$$

の温度変化を示す。(文献 [1] より)

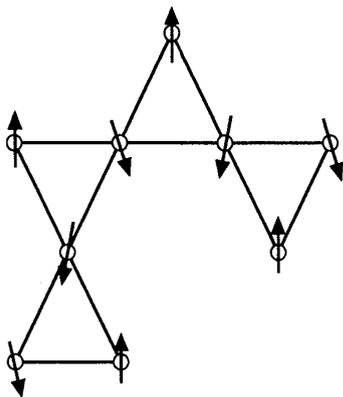


図 3

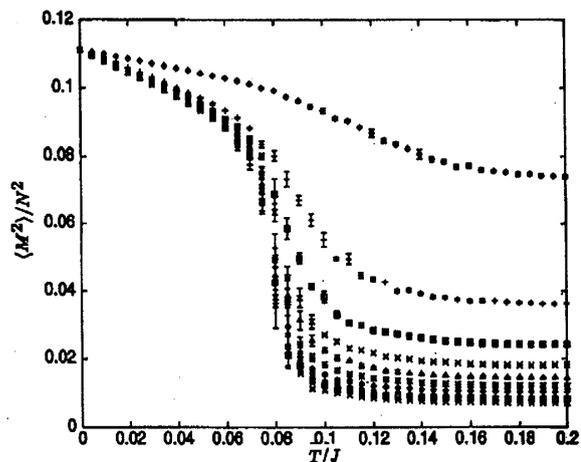


図 4

ここで奇妙なのは、かごめ格子の局所的縮退のため基底状態は巨視的な数の縮退を持っていることである。この自由度を表すのに風見鶏変換ループの考え方を導入しよう。図5に示すように、 z 軸に平行なスピンのよって囲まれた領域にある斜め方向のスピンは、一斉に z 軸のまわりに回転してもエネルギーは変化しない。ここで、黒い点が z 軸に平行なスピンを表している。白い点は斜め方向を向いた点である。これが局所的転換で風見鶏変換という。風見鶏変換を行うループを風見鶏変換ループということにしよう。

最低の風見鶏変換ループはかごめ格子の6角形をまわるものである。しかし高温から温度を下げてきた場合、どのような風見鶏変換ループができるかは予め決まっていない。一つの風見鶏変換ループの組から他の組へ変換するには風見鶏変換ループをつなぎ変えなくてはならない。つなぎかえる際には少しエネルギーの高い状態を通らなくてはならないので、アクチベーションエネルギーが必要となる。実際、一様な磁化が出現した相転移点以下のしばらくの温度では風見鶏変換ループのつなぎ換えが起こり、スピン配位は頻繁に変化する。しかし、ある温度以下では、風見鶏変換ループのつなぎ換えがほとんど起こらず、状態はほぼクエンチされる。この境界の温度では比熱に緩やかなピークが現れる。この点での変化はあくまでクロスオーバーである。

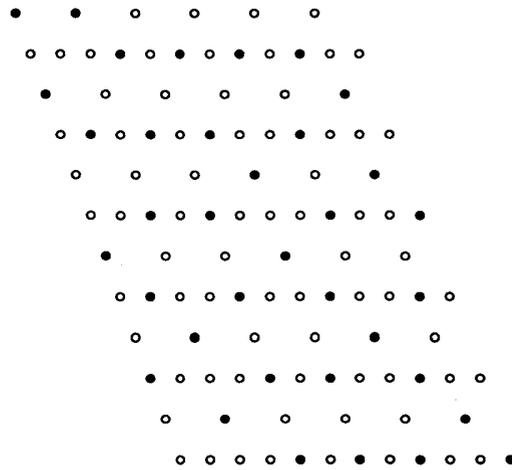


図5

このようなマクロに縮退した強磁性状態では秩序状態でのスピン波は風見鶏変換ループの中でのみ伝搬し、極めて局在していることも確かめられている。[2]

三次元系での相転移

以上でみた奇妙な強磁性相転移を示す機構は、三次元ではどのように働くのであろうか。それを調べるため、我々は層状のかごめ格子の上でのイジング異方性をもつハイゼンベルグ反強磁性体の相転移を調べている。図6 (a)に自発磁化の温度変化に相当する m^2 の温度変化を示す。この場合も有限温度で自発磁化の出現があることが確認できた。図6 (b)に比熱を示す。二次元の場合は非常に鋭い発散的な振る舞いがみられ、二次元イジング模型の場合と同一視できたのに対し、三次元では非常に緩やかなピークが二つ現れてい

る。それらは強いサイズ変化を示さず、熱力学的極限でも発散しないと考えられる。

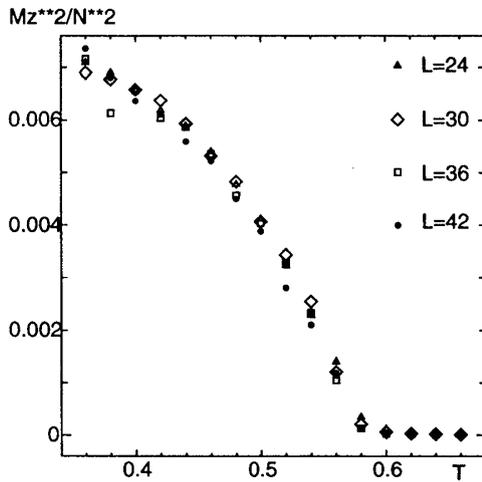


図 6 (a)

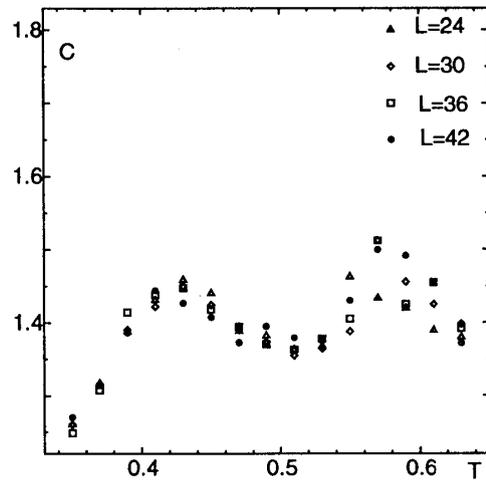


図 6 (b)

低温側のピーク以下の温度では、風見鶏変換ループはほとんど変化しないことが確認された。三次元では風見鶏変換ループは層間の方向に平行に続き風見鶏変換シートと呼ぶべきものになっている。層間の方向にはフラストレーションがなくこの方向の相関長の成長は非常に早い。

このようなある一つの方向に相関長が成長しやすい場合、相転移の様子を有限系で調べるのは、層状三角格子の部分無秩序相と低温のフェリ相の間の相転移同様に難しい問題である。層間方向の相関があくまで有限であるとしてスケールした系での相転移を考えると一次相転移を示すはずであるが、そこでのエネルギーの特異性はもとの系では相関長分の1になるので、実際にはその特異性はほとんどみえない。[3] 層状三角格子反強磁性イジング模型の場合にはソリトンが走ることで状態が変化させられたが、かごめ格子の場合は、風見鶏変換ループのつなぎ換えを行う局所励起が面間を走ることで状態の変化が起こると考えられる。

高温から急冷した場合、 z 軸に平行なスピンによって囲まれた領域の成長の途中で局所的に解消が困難な矛盾のある配位が生じることが考えられる。そのような欠陥の解消には長い時間がかかりスピングラス的な振る舞いの原因となりうるということが考えられる。

また、高温部の転移が三次元イジング模型の鋭い発散と異なり、非常にブロードなピークになっている点に関しては系が完全なイジング系でなく実効的な対称性が同じだけであるので、不純物系でのハリスのクライテリオンのような機構があるのかもしれない。

現状では、これらのブロードな比熱のピークの機構は明らかでないが、具体的な励起の様子などを詳しく調べて、それらを明らかにしていきたい。また、風見鶏変換ループの考え方は三次元の他のフラストレート系でも有効であり、それらでの効果についても調べていく。

[1] A. Kuroda and S. Miyashita
Existence of Phase Transition in Ising-like Heisenberg Antiferromagnets on the Kagome Lattice
J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 4509-4512

[2] A. Kuroda and S. Miyashita, unpublished.

[3] N. Todoroki and S. Miyashita, unpublished.