

p-30

三角目入りカゴメ格子の磁氣的性質に関する理論計算

千葉大学自然科学研究科 名取 亮、夏目雄平

三角格子反強磁性体、カゴメ格子反強磁性体のモデルが、量子磁性体研究をおおいに発展させた。その延長線上の磁性体として、ここでは、三角目入りカゴメ格子 (Triangulated Kagomé Lattice) について理論的に論ずる[1]。このモデルは現実的なものである：実際の銅化合物 $\text{Cu}_2\text{Cl}_2(\text{cpa})_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ についての実験的研究が Mekata ら[2]によって進められている。spin=1/2 を持つ Cu^{2+} のスピン格子点を図 1 (下左図) に示す。カゴメ格子の三角形 $\triangle$ にさらに小さな三角目 $\triangle$ を入れ込んだ構造である。実験的研究より、入れ込んだ三角形 $\triangle ABC$, $\triangle DEF$ の辺は反強磁性 Heisenberg 交換相互作用 J_{AF} で、元のカゴメ格子点 $\triangle PQR$ の頂点と $\triangle ABC$, $\triangle DEF$ の頂点の間は強磁性 Heisenberg 交換相互作用 J_F と予測される。

ここへ図 1 の矢印で示した 9 副格子の Néel 構造(提案は M.Mekata)を考え、線形スピン波展開の方法を用い、分散の計算を行った。($|J_F/J_{AF}|=0.5$ としたものを図 2 (下中図) に示す。) その結果、分散のないモードが 3 つ現れ、1 つは励起エネルギーが 0 であるが、2 つは有限の励起エネルギーを持つ。これは系の半局所的な対称性によって半局所的連続縮退を反映するモード(flat mode)が現れるというカゴメ格子反強磁性体の特徴に加えて、三角形反強磁性体 1 つが 3 つのスピン波自由度を持つことによる flat mode の分裂が起きているともみなせる。この系での半局所的な対称性は図 1 で陰影をつけた凸凹のある 18 角形をなす loop に対応している。このスピン波分散に基づいて、基底エネルギーの量子効果による減少も計算した。それらを有限系厳密対角化による数値計算の結果と比較する。

以上のスピン波展開法は図 1 の 9 副格子の Néel 構造を仮定しているが、これの妥当性を調べるため、この系について古典スピン系のモンテカルロ計算をして、特に低温でのスピンの振る舞いを調べた。図 3 (下右図) にエネルギーの温度に対する変化を、色々な $|J_F/J_{AF}|$ について示す。帯磁率、スピンのパターン図などについても論じ、この系の磁氣的性質を調べる。

[1] R.Natori, Y.Watabe and Y.Natsume, J.Phys.Soc.Jpn **66** (1997)3687.

[2] M.Mekata, M.Abdulla, T.Asano, H.Kikuchi, T.Goto, T.Morishita and H.Hori, J.Mag.Mag.Mat. **177-178**(1998)731.

