

文 献

- 1) H. Ishii, J. Kanamori and T. Nakamura : Prog. Theor. Phys. 33No.5 に出る予定
- 2) たとえば J. Kanamori : Prog. Theory. Phys. 20 (1958) 890.
- 3) I.S. Jacobs, S Roberts and P.E. Lawrence : to be published
- 4) M.K. Wilkinson, J.W. Cable, E.O. Wollan and W.C. Koehler: Phys. Rev. 113 (1959) 497.
- 5) K. Ono, A. Ito and T. Fujita : J. Phys. Soc Japan 19 (1964) 2119.
- 6) 伊達宗行: パルス電磁石 物性 5 (1964) 645.
- 7) J. Kanamori : J. Phys. Chem. Solids 10 (1959) 87.
- 8) M. Motokawa and M. Date : J. Phys. Soc. Japan 20 (1965) 465. なお関連した理論をうぎに金森氏が書いておられる。

CoCl₂ · 2H₂O のスピン配列

— Ising 模型の基底状態をきめる一方法 —

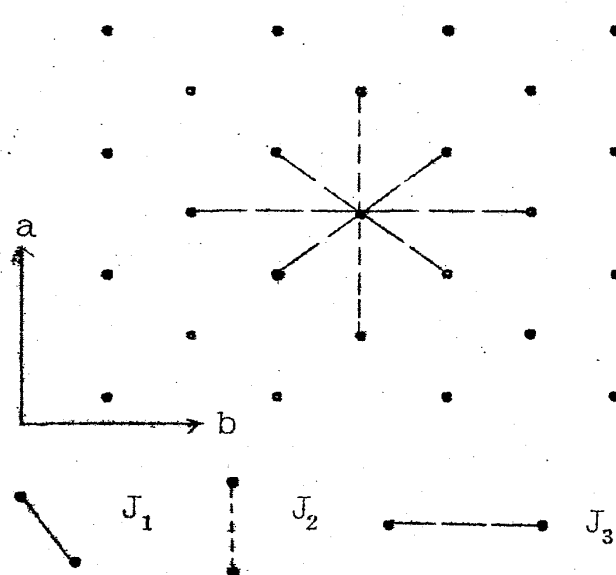
金 森 順 次 郎 (阪大理)

(6月21日 受理)

Ising spin system でとくに外部磁場の存在する場合にエネルギーの最低状態を決定する事は、Heisenberg 模型の場合に比べて容易とはいえない。後者の場合には、Yoshimori-Kaplan による Spin の Fourier 変換を用いる方法が有力であるが、これは Ising Spin には適用できない。以下で、CoCl₂ · 2H₂O について Oguchi-Takano¹⁾ によつて提案された Ising 模型に例をとつて、基底状態を厳密に求める一つの方法を提案する。

$\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ の結晶は monoclinic で反強磁性体 ($T_N = 17.2^\circ \text{K}$) である。Kobayashi-Haseda²⁾ は、 4.2°K で b 軸方向に磁場をかけて、32 koe と 46 koe とで磁化が急激に増加し、此等の磁場で相転移が起つてい

らしい事を見出した。46 koe 以上は強磁性状態であり、32 koe 以下は反強磁性状態である。32 koe $< H < 46$ koe では磁化は強磁性状態の約 $\frac{1}{3}$ である。この結晶は C 軸方向に走る $-\text{CoCl}_2-$ の chain の集りとみる事ができ、Kobayashi-Haseda²⁾ によつて指摘されたように、一つの chain の中での隣り合う Co は強磁性的交換相互作用で強く結合している。Co のスピンは大きい異方性のために b 軸に平行か反平行の二つの状態しかとりえない。以上の事から、一つの chain の全磁化を b 軸方向の一つの Ising Spin で代表させ、結晶全体のスピン配列を、一つの $a-b$ 面での二次元 Ising model のスピン配列であらわしてもよいと考えられる。 $a-b$ 面での Co の配置は面心矩形格子であつて、chain 間の相互作用を次の三種類の相互作用であるとする。相互作用のエネルギーを $J_i \sigma_1 \cdot \sigma_2$ ($i=1, 2, 3$, $\sigma_1 = \pm 1$, $\sigma_2 = \pm 1$) として、 J_1 相互作用は、一つの Co と対角線方向で隣接する 4 つの Co との間に働く。 J_2 相互作用は a 軸方向の隣り合う Co の間に、 J_3 相互作用は b 軸方向の隣り合う Co の間に働く。Oguchi-Takano¹⁾ 及び Narath³⁾ はこの model を仮定して外部磁場の存在す



第一図

する時の基底状態を議論した。これらの理論は、格子を直観的にえらんだいくつかの部分格子に分け各部分格子の上ではスピンはいつでも平行であつて、磁場が小さいときは、正の方向の磁化をもつ部分格子と負の方向の磁化をもつ部分格子が等しい数だけ存在し、磁場がある程度大きくなると、負の方向の磁化の部分格子の内一つ乃至二つが向きを変えて強磁性状態

の $\frac{1}{2}$ 又は $\frac{1}{3}$ の磁化をもつ中間状態にうつると考える。このような中間状態は、反強磁性又は強磁性状態に比べて磁場のある範囲ではエネルギーが低い

金森順次郎

が、エネルギーの最低状態かどうかは、部分格子に分割する方法では答えられない。以下新しい方法を議論する。

外部磁場 H が極端に大きいときは、全部のスピンが正の方向を向いた強磁性状態が最低状態である。この状態を基準にとると、任意のスピン配列は、負の方向のスピンを占める格子点の分布で与えられる。今 J_i の相互作用をする二つのスピンを結ぶ線を J_i -作用線と名づけると、与えられたスピン配列のエネルギーは、負の方向のスピン総数 m と、負のスピンを両端にもつ J_i 作用線の数 p_i 又は負のスピンと正のスピンを結ぶ作用線の数 q_i であらわすことができる。以下我々はいつでもトーラス面上の格子を考えているとする。今 J_1, J_2, J_3 がすべて正（反強磁性的）とすると、あるスピン配列のエネルギー E は

$$E = E_F + 2m[H - (4J_1 + 2J_2 + 2J_3)] + 4(J_1 p_1 + J_2 p_2 + J_3 p_3) \quad (1)$$

但し E_F は強磁性状態のある磁場 H の下でのエネルギーである。もし例えば J_1 が負の時は

$$2p_1 + q_1 = 4m \quad 2p_2 + q_2 = 2p_3 + q_3 = 2m \quad (2)$$

に注意すると

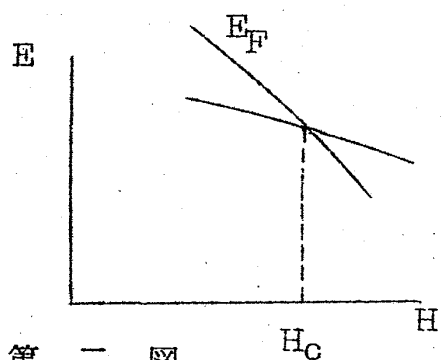
$$E = E_F + 2m[H - (2J_2 + 2J_3)] + 2|J_1|q_1 + 2J_2 p_2 + 2J_3 p_3 \quad (3)$$

とも書ける。

(1)式又は(3)式は容易に導けるので証明は省略する。(1)式又は(3)式の重要な利点は、 p_i 又は q_i に関係した項がいつでも正又は零で負にならないという点である。以下 J_1, J_2, J_3 すべて正の場合のみを議論する。明かに $H > 4J_1 + 2J_2 + 2J_3$ では、 $E \geq E_F$ したがって強磁性状態は最低状態である。

$H = 4J_1 + 2J_2 + 2J_3$ では、 $m \geq 0$ $p_1 = p_2 = p_3 = 0$ の状態はすべて同じエネルギーをもつ。第二図を考えると此等の中で m が最大、したがって磁化が最小のものが、 H が $4J_1 + 2J_2 + 2J_3$ より少し低い時には最低状態である。

したがって、問題は $p_1 = p_2 = p_3 = 0$ で m の最大値を求めるという topological な問題に帰着される。別の言葉では、強磁性状態から出発して、負の



第二図

スピンを作つてゆくとき、相互作用する位置に二つの負のスピンがこないようにしたら、最大何ヶ負のスピンを作れるかということである。

証明は後で簡単に記すが、 p_1, p_2, p_3 と m との間には次の不等式が成立する。

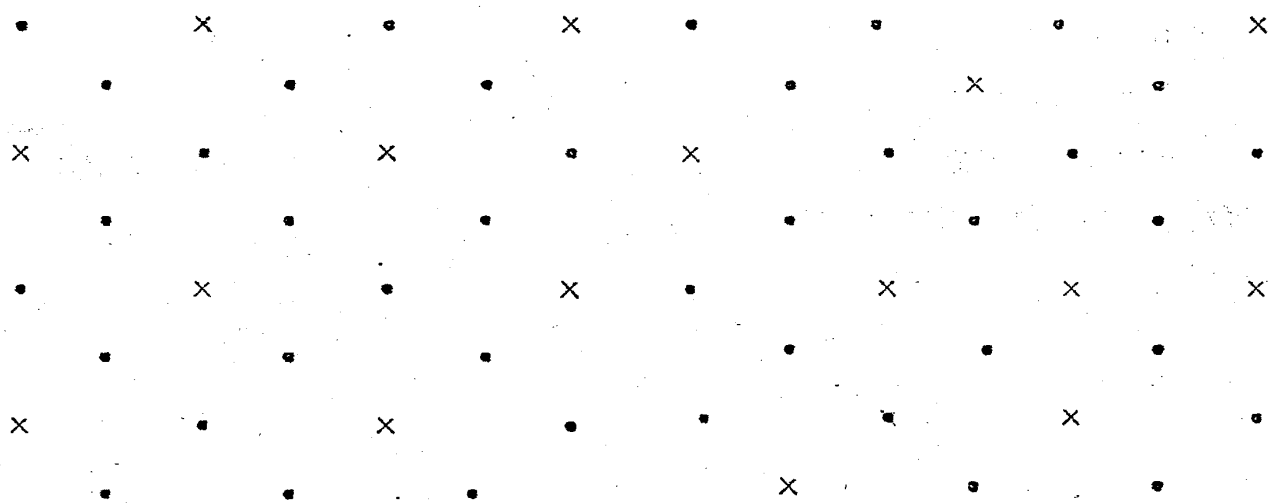
$$p_1 + \left(\frac{1}{2}\right)(p_2 + p_3) \geq 2\left\{m - \left(\frac{N}{4}\right)\right\} \quad (4)$$

$$p_1 + p_2 \geq 3\left\{m - \left(\frac{N}{3}\right)\right\} \quad (5)$$

$$p_1 + p_2 \geq 3\left\{m - \left(\frac{N}{4}\right)\right\} \quad (6)$$

但し右辺は m が $\frac{N}{4}$ 又は $\frac{N}{3}$ より小さい時は 0 とする。

(4)式から、 $p_1 = p_2 = p_3 = 0$ の条件の下での m の最大値は $\frac{N}{4}$ である事が分る。このような状態は無数にある。Oguchi-Takano²⁾ によつて指摘された状態もその内の一つである。第三図に例を示した。



第三図 • 正スピン x 負スピン

以上の様に H が $4J_1 + 2J_2 + 2J_3$ より少し低いところの最低状態を決定する事が出来たが、 H が更に小さくなると p_1, p_2, p_3 がすべての 0 でないような ($m > \frac{N}{4}$) 状態の方がエネルギーが低くなる。この様な状態も (4), (5), (6) を用いると決定する事ができる。以下 $J_1 > J_2 + J_3$, $J_2 > J_3 > 0$ の場合だけを

金森順次郎

例として取上げる。此の時は、

$$4(J_1 p_1 + J_2 p_2 + J_3 p_3) = 8J_3 [p_1 + (p_2 + p_3)/2] + 4(J_2 - J_3)p_2 + 4(J_1 - 2J_3)p_1 \quad (7)$$

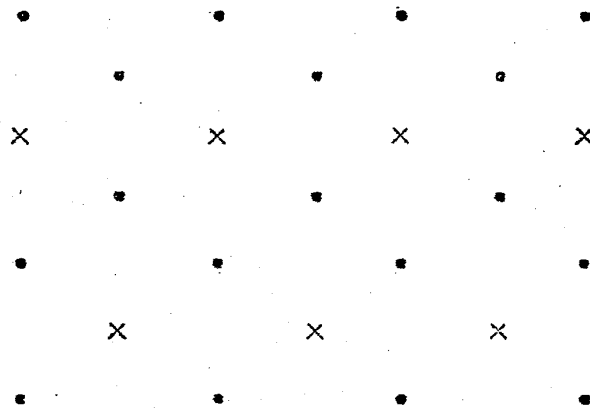
に注意すると(4)式から

$$4(J_1 p_1 + J_2 p_2 + J_3 p_3) \geq 16J_3 [m - (N/4)] \quad (8)$$

である。(8)で符号は $p_1 = p_2 = 0$, $p_3 = 4[m - (N/4)]$ の場合に限る。今 $m = \frac{N}{4}$ $p_1 = p_2 = p_3 = 0$ の状態のエネルギーを $E(M/2)$ とすると、(8)式を用いて

$$E - E(M/2) \geq 2(m - N/4)[H - (4J_1 + 2J_2 - 6J_3)] \quad (9)$$

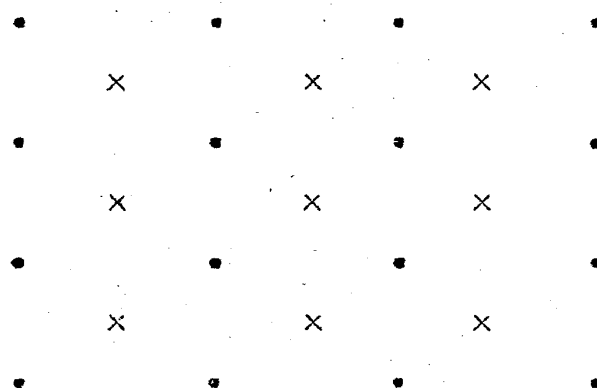
を得る。これから $m > N/4$ の状態は $H < 4J_1 + 2J_2 - 6J_3$ に最低状態になる可能性があることがわかる。特に符号が成立して、しかも m が一番大きい状態が H が $4J_1 + 2J_2 + 6J_3$ より少し低いところでは最低状態である。このような状態は実際に存在する。(5)式から $p_1 = p_2 = 0$ の下での m の最大値は $N/3$ であつて、(9)で符号が成立するためには、 $p_3 = 4(m - N/4) = \frac{N}{3}$ ($m = \frac{N}{3}$) でなければならない。第四図に此の様な条件を満足する状態を示す。これは一つしかない。



第 四 図

此の状態は、磁化が強磁性状態の $\frac{1}{3}$ で Narath³⁾ によつて指摘された状態である。

更に磁場が小さくなつたときも同じ様な議論で $H = 4J_1 - 4J_2$ で反強磁性状態にうつる事が結論される。その状態を第五図に示した。



第五図

Date-Motokawa⁴⁾ によつて見出されたヒステシスその他を上記の構造にもとづいて定性的に説明する事が出来るがここでは省略する。

上述の方法は三次元の場合にも拡張できる。とくにすべての相互作用が反強磁性的な時の磁化曲線は必ず数段階の階段曲線になる筈である。又強磁性的な相互作用が存在する場合も同様に取り扱える。例えば J_1 が負のときは、エネルギー表式については(3)を用い、不等式としては

$$q_1 + 2p_2 \geq 2m \quad (10)$$

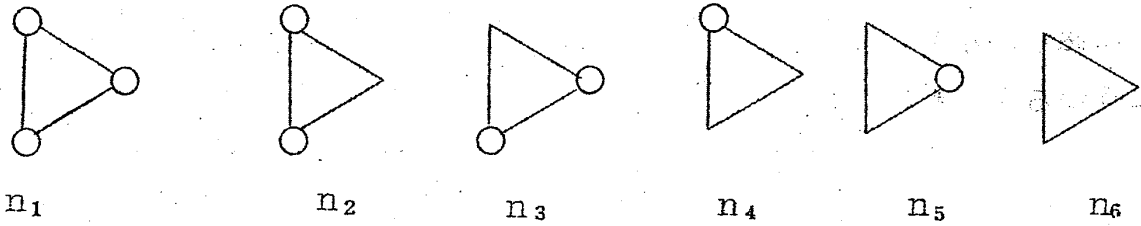
$$q_1 + 2p_3 \geq 2m \quad (11)$$

を用いる。

最後に(4), (5), (6), (10), (11) の topological relation の証明を簡単に示す。此の様な関係を見つけることが上記の方法の最も重要な点であるが、たいていの場合簡単に導ける。例として(5)を証明する J_1 作用線と J_2 作用線で作られる格子は三角格子である。一つの三角形は二つの J_1 作用線と一つの J_2 作用線からなる、一つの格子点は六つの三角形で共有され、一つの作用線は二つの三角形で共有される。三角形を分類して、三頂点とも負スピンの占められてい

金森順次郎

るものの数を n_1 , 以下第六図のように定議する。



○は負スピン, | は J_2 作用線, \ / は J_1 作用線

第 六 図

$n_1, n_2, \dots$ と N, m, p_1, p_2 との間には次の関係式が成立する。

$$n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + n_5 + n_6 = 2N \quad (12)$$

$$3n_1 + 2n_2 + 2n_3 + n_4 + n_5 = 6m \quad (13)$$

$$2n_1 + n_3 = 2p_1 \quad (14)$$

$$n_1 + n_2 = 2p_2 \quad (15)$$

以上の式から

$$2(p_1 + p_2) = 3n_1 + n_2 + n_3 \quad (16)$$

一方 $6m - 2N$ は

$$6m - 2N = 2n_1 + n_2 + n_3 - n_6 \quad (17)$$

(16), (17) を比べると明らかに(5)式が成立する。

最後に此の問題を教えていただいた伊達さんに感謝します。

文 献

1) T. Oguchi and F. Takano ; J. Phys. Soc. Japan 19

1265 (1964)

Short note

- 2) H. Kobayashi and T. Haseda. J. Phys. Soc. Japan 19

765 (1964)

- 3) A. Narath, Phys. Letter 13. 12 (1964)

- 4) M. Motokawa and M. Date J. Phys. Soc. Japan 20

465 (1965)