

層状物質での相転移と秩序状態

東京大学工学系研究科物理工学専攻 吉濱 豊, 宮下 精二

二次元反強磁性三角格子 XY スピンモデルを層状に積み重ねて得られる三次元反強磁性 (HCP-like) 格子模型において、面間の相互作用を変化させた時の秩序状態を、モンテカルロ法を用いて調べた。このモデルでは面間の相互作用が非常に弱い場合には基底状態でカイラル相が現れ、面間の相互作用を強くしていくにしたがって基底状態のスピンの構造が連続的に変化しサイズ依存性のある incommensurate 相が基底状態で無限に存在することが解った。また、ある特定の面間の相互作用において基底状態で巨視的なスピン構造が現れることがわかり、新しいオーダーパラメータの定義をおこない温度を変化させた場合の相転移の様子を調べた。

1 イントロダクション

反強磁性三角格子のスピン秩序状態は非常に興味のある問題であり、今までに様々な秩序過程の研究が行われてきた [1, 2, 3]。さらに、二次元の三角格子を層状に重ねて得られる格子、図 1 のような構造を持つ六方細密充填構造 (HCP) は二次元の三角格子によるスピン競合に加えて面間のスピン競合が加わるためより複雑なフラストレーションにより、様々な興味深い秩序状態が期待される。しかし三次元系の XY 模型での秩序無秩序転移の研究は単純立方格子や六方格子（細密充填ではない）においては広範囲に行われているにもかかわらず HCP 構造ではほとんど行われていない。[4] ここでは我々は XY 模型の HCP-like の格子模型について面間の相互作用の変化によりどのような秩序状態が得られるかを、またモンテカルロ法を用いて秩序無秩序転移の様子について研究した。同様の格子模型において Ising 模型での研究も少ないが行われており基底状態での様々な相が示されている [5, 6, 7]。

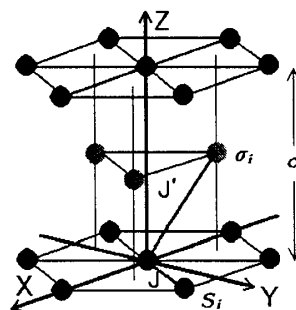


図 1 : 結晶構造。 J 、 J' はそれぞれ面内、面間の相互作用

2 基底状態

各面間の相互作用でどのような秩序変数を考えればよいのかを決める為にフーリエ変換を用いて基底状態を求める。注目するスピンにより結晶格子の対称性が異なるためにここでは、図 1 に表したように偶数、奇数番目の層にあるスピンをそれぞれ S_i 、 σ_i として分けて考えると、ハミルトニアンは

$$H = J \sum_i \vec{S}_i \cdot \sum_j^{\text{面内}} \vec{S}_j + J' \sum_i \vec{S}_i \cdot \sum_j^{\text{面間}} \vec{\sigma}_j + J \sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \sum_j^{\text{面内}} \vec{\sigma}_j + J' \sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \sum_j^{\text{面間}} \vec{S}_j \quad (1)$$

と書ける。ここで J は面内、 J' は面間のスピン相互作用である。(1) 式の S_i 、 σ_i に対してそれぞれフーリエ変換を行い基底エネルギーを求めると、

$$E(\vec{k}) = J\alpha(\vec{k}) \pm J' \cos\left(\frac{c}{2}k_z\right) \sqrt{2\alpha(\vec{k}) + 3} \quad (2)$$

$$\alpha(\vec{k}) = \cos(k_x) + 2\cos\left(\frac{1}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) \quad (3)$$

が得られ、 J'/J を変化したときエネルギーを最小にする $\alpha(\vec{k})$ が決まり、面間の相互作用の変化により系の基底のスピン構造は連続的に変化することが分かる。各相互作用でのスピン構造とそこでの秩序変数を以下の節で示す。

3 秩序変数

面間の相互作用の変化に対し基底のスピン構造は連続的に変化するが代表的な相を考え、それらについての秩序変数を考える。

3.1 $J'/J \ll 1$ の場合

面間の相互作用が弱い領域では系は二次元的性質が強く表れると考えられるため二次元反強磁性三角格子の秩序変数として導入された [1] 以下で定義される Chirality(κ) を用いた。

$$\kappa = \frac{1}{N} \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{i \in A, j \in B, k \in C} (\vec{S}_i \times \vec{S}_j + \vec{S}_j \times \vec{S}_k + \vec{S}_k \times \vec{S}_i) \quad (4)$$

ここで、 A 、 B 、 C はそれぞれ三角格子の副格子、 $N(=L^3)$ はスピン数を表し、Chirality は三角格子における 3 つの副格子スピンの外積で図 2 のように二次元面内で 120° 構造をとると 1 になる量である。ここで大きさの異なるスピンはそれぞれ偶数、奇数番目の層におけるスピンを表す。図 3 に $J'/J = 0.10$ の場合の秩序変数と温度の関係を示す。

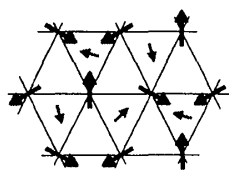


図 2 : $J'/J \ll 1$ 時の基底状態のスピン構造

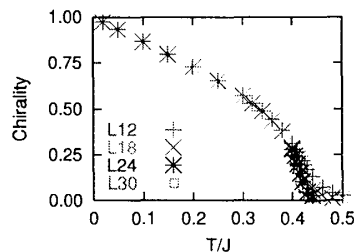


図 3 : $J'/J = 0.10$ の場合の Chirality

3.2 $J'/J \approx 1$ の場合

この領域では図 5 のような相が得られると考えられ以下のような秩序変数を用いた。

$$LST = \frac{1}{L^2} \left\{ \sum_{i \in F} \left[\sum_i (-1)^i \vec{S}_i \right]^2 + \sum_{i \in G} \left[\sum_i (-1)^i \vec{S}_i \right]^2 + \sum_{i \in H} \left[\sum_i (-1)^i \vec{S}_i \right]^2 \right\} \quad (5)$$

ここで、 F 、 G 、 H は図4で示すように二次元平面での各方向への和であり、例えば $J'/J = 1$ の場合秩序状態では基底状態が縮退しているために $1 \leq LST \leq 2$ の値をとる。図6は $J'/J \approx 1$ の場合の秩序変数の変化である。

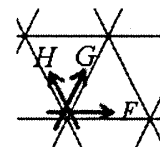
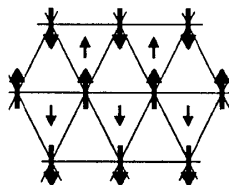
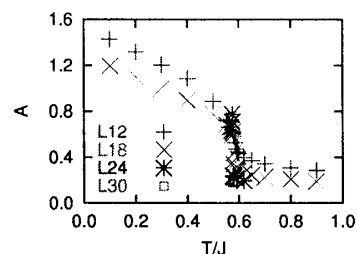
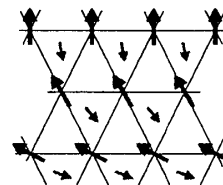


図4：方向

図5： $J'/J \approx 1$ 時の基底状態のスピ
ン構造図6： $J'/J = 1.00$ の場合の LST

3.3 $J'/J \approx 2$ の場合

この領域の相転移は図7に注目しても分かるようにシステムのサイズに基底状態が大きく依存してしまうために今回は比熱の異常で転移点を決定するに留めた。

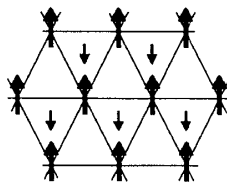
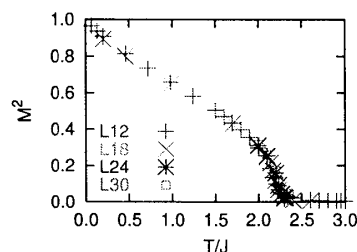
図7： $J'/J \approx 2$ 時の基底状態のスピ
ン構造

3.4 $J'/J \geq 3$ の場合

面間の相互作用がある程度以上に強くなると、面間で偶数、奇数番目の層でそれぞれのスピンの向きが逆を向く図8のような相が考えられ、磁化に対応されるような以下のような秩序変数を用いた。

$$M^2 = \frac{1}{N} \left(\sum_{i \in D} \vec{S}_i - \sum_{i \in E} \vec{S}_i \right)^2 \quad (6)$$

D 、 E はそれぞれ偶数、奇数番目の層にあるスピンについての和であり、秩序状態でこの秩序変数は1になる。

図8： $J'/J \geq 3$ 時の基底状態のスピ
ン構造図9： $J'/J = 3.00$ の場合の M^2

4 二相共存

前節で得られたグラフで $J'/J = 0.10$ の場合には秩序変数は連続に変化し二次転移的であるが、 $J'/J = 1.00$ の場合の秩序変数の変化は転移点近傍で不連続に変化し一次転移的な様子を示している。そこで、面間の相互作用の変化で一次転移と二次転移の境界を求めるために、転移点近傍においてモンテカルロステップ毎に最も多く現れるエネルギーと面間の相互作用の関係を調べ図 10 に示した。図 11 は図 10 で得られるエネルギーの幅 (ΔE) と面間の相互作用の関係を表示したものである。ここでは $J'/J \approx 0.13$ において二次転移的相転移から二次転移的相転移に変化することがわかった。

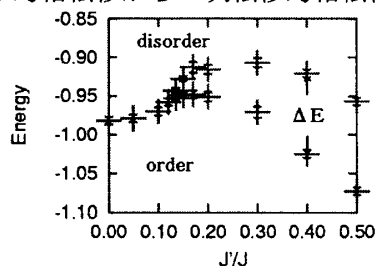


図 10 : 転移点近傍で多く現れるエネルギーと面間の相互作用の関係

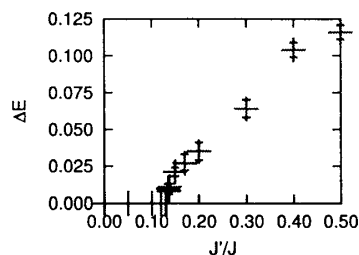


図 11 : エネルギーの幅と面間の相互作用の関係

5 結論及び考察

本研究では反強磁性 HCP-like 格子において XY 模型でフーリエ変換、モンテカルロ法を用いて秩序状態におけるスピン構造を得た。また、一次転移と二次転移が面間の相互作用の違いによって現れる事を確かめその転移点となる相互作用の値を求めた。

参考文献

- [1] S.Miyashita and H.Shiba: J. Phys. Soc. Jpn. **53**(1984)1145.
- [2] H.Kawamura and S.Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. **53**(1984)4138.
- [3] S.Miyashita and H.Kawamura: J. Phys. Soc. Jpn. **54**(1985)3385.
- [4] T.Sakakibara: J. Phys. Soc. Jpn. **53**(1984)3607.
- [5] D.Gratias, J.M.Sanshez and D.de Fontaine: Physica **A 113**(1982)315.
- [6] C.Bichara, S.Crusius and G.Inden: Physica **B 182**(1992)42.
- [7] M.Shimono and H.Onodera: Physica Rev. **B 61**(2000)14271.