

令和元年6月4日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17748

研究課題名（和文）フラストレート磁性体における格子歪みの効果の理論的研究

研究課題名（英文）Theoretical study of lattice-distortion effects on the spin ordering in frustrated magnets

研究代表者

青山 和司 (Aoyama, Kazushi)

大阪大学・理学研究科・助教

研究者番号：00623133

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,300,000円

研究成果の概要（和文）：磁性体において、格子上のスピン間に相互作用の競合、すなわち磁氣的フラストレーションが存在する場合には、系は低温まで安定な構造に落ち着くことができない。このような場合、しばしばベースとなる格子を歪ませることでフラストレーションを解消し、磁気長距離秩序が出現する。本研究では、パイロクロア格子反強磁性体を対象とした数値解析を行い、対応する磁性体であるスピネルクロム酸化物において「局所的な」格子歪みが重要な役割を果たしていることが明らかとなった。また、フリージングパイロクロアと呼ばれる非一様な格子構造は、長距離秩序でありながら残留エントロピーをもつ新奇磁性相を実現する舞台となることも明らかとなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

物質を構成する電子は電荷とスピンの2つの自由度をもち、それぞれ物質の電氣的性質、磁氣的性質を担っている。通常、金属では電荷が、磁性体ではスピンの主役となる。一方、マルチフェロのような電氣と磁氣が相関する機能的物質では、固体中の電子軌道や結晶格子など電荷に関わる自由度とスピン自由度の結合が重要である。フラストレート磁性体と呼ばれる結晶格子上のスピン間に複雑な相互作用が働く磁性体におけるスピン-格子結合の効果を取り扱った本研究の成果は、機能的物質をはじめ、トポロジカル絶縁体や超伝導体などスピン自由度と電氣的自由度の結合が重要となる様々な物質群の研究に新たな知見をもたらすものである。

研究成果の概要（英文）：In frustrated magnets, spins residing on a lattice cannot settle in a stable structure down to low temperatures due to complex competitions between magnetic interactions. In such a situation, it often happens that spins are coupled to the lattice degrees of freedom and the underlying lattice is distorted spontaneously to resolve the magnetic frustration, leading to a magnetic long-range order. In this work, bearing spinel chromium oxides in our mind, we theoretically investigate lattice-distortion effects in antiferromagnets on pyrochlore lattices. It is found by means of numerical simulations that local lattice-distortions play an important role in this class of antiferromagnets.

研究分野：物性理論

キーワード：フラストレート磁性体 スピン-格子カップリング パイロクロア格子

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

磁性体において、格子上的スピン間に相互作用の競合、すなわち磁氣的フラストレーションが存在する場合には、系は低温まで安定な構造に落ち着くことができない。このような場合、しばしば格子を歪ませることでフラストレーションを解消し、磁気長距離秩序が出現する。パイロクロア格子反強磁性体であるスピネルクロム酸化物 ACr_2O_4 ($A=Zn, Cd, Hg, Mg$) はその典型例であり、格子構造の変化を伴った反強磁性転移が生じている。これはスピン-格子カップリングの重要性を示唆しており、実際、この系の磁場下の物性は、定性的には格子歪みの効果で説明することができる。一方、ゼロ磁場の磁気構造については、複雑かつ物質ごとに性質が異なるため、その発現メカニズムについて十分な理解が進んでいなかった。

2. 研究の目的

スピネルクロム酸化物 ACr_2O_4 を念頭に、パイロクロア格子上的古典 Heisenberg 反強磁性体において、格子歪みの効果によりどのような磁気秩序が実現するのかを理論的に明らかにすることが本研究の目的である。“局所的な”格子歪みは、スピン-格子カップリングを通じて、スピンを共線的 (コリニア) にする傾向があり、このコリニア性が、フラストレーションの下、磁気秩序形成にどのような役割を果たすのかを明らかにし、対応する磁性体 ACr_2O_4 の低温磁気構造秩序形成の起源に迫る。また、フラストレート磁性体の典型例である三角格子反強磁性体に対しても、局所格子歪みに起因したコリニア性が系の磁氣的性質に与える影響を明らかにする。

3. 研究の方法

本研究では、格子歪みとして局所的な Einstein phonon の効果を取り入れる。格子歪みがもたらすスピン間有効相互作用を導出し、得られたスピンハミルトニアンに対し、モンテカルロ数値シミュレーションを行う。比熱やスピン構造因子をはじめとする様々な物理量を相補的に調べることで、相転移の性質や安定な磁気構造を明らかにする。

4. 研究成果

本研究の舞台となるのはパイロクロア格子であり、これは正四面体が頂点を共有することで構成される 3 次元ネットワーク格子である。我々は、(1) この通常のパイロクロア格子、および (2) 近年実現されるようになったブリージングパイロクロアと呼ばれる新しいタイプのパイロクロア格子を対象に、格子歪みによって引き起こされる磁気秩序の性質を明らかにした。また、(3) 三角格子反強磁性体において、この系特有の磁気励起が輸送現象に大きな影響を及ぼすことを明らかにした。以下、その詳細を報告する。

(1) パイロクロア格子 Heisenberg 反強磁性体における局所格子歪みの効果

この系ではゼロ磁場下で、スピン-格子カップリングの強さに応じて、規則的な格子構造の変化を伴う 2 タイプのコリニアな磁気長距離秩序が 1 次転移を経て現れることが明らかとなった。

カップリングの弱い領域では、波数 $(1, 1, 0)$ の Bragg ピークで特徴付けられる tetragonal-symmetric な磁気秩序が実現し、この磁気構造は、対応する磁性体である ACr_2O_4 ($A=Zn, Cd, Mg, Hg$) の多くで報告されている反強磁性相のスピン構造と類似したものである。一方、対応する実験系はまだ報告されていないが、カップリングの強い領域では、波数 $(1/2, 1/2, 1/2)$ の Bragg ピークで特徴付けられる cubic-symmetric なコリニア秩序が実現することが明らかとなった。本内容に関する論文は、Physical Review Letters 誌に掲載済である。

磁場下の性質に着目すると、カップリングの弱い領域の磁化過程には $1/2$ -プラトーが確認され、そのプラトー領域では磁気構造は cubic-symmetric となっていることが理論的に明らかとなった。これらの理論結果は、 $CdCr_2O_4$ や $HgCr_2O_4$ の磁場下の実験結果とコンシステントであり、スピネルクロム酸化物においては、Einstein phonon の効果が重要な役割を果たしていることが示唆される。一方、カップリングの強い領域の磁場下の磁気構造はやや複雑であり、今後さらなる詳細な調査が必要である。

(2) ブリージングパイロクロア格子 Heisenberg 反強磁性体における局所格子歪みの効果

近年クロム酸化物で実現されるようになった、一辺の長さが異なる大小の正四面体が交互に連なったブリージングパイロクロアと呼ばれる新しいタイプのパイロクロア格子反強磁性体を対象に、局所格子歪みの効果について解析を行った。通常のパイロクロア格子にも存在する局所格子歪みの効果に加え、ブリージング性を大小の四面体上の最近接相互作用の比 J'/J に取り入れ数値解析を行った結果、スピン-格子カップリングが比較的強い領域で、ブリージング性に起因した新奇なコリニア磁気秩序が実現することが分かった。

カップリングが強い領域では、通常 ($J'/J=1$) のパイロクロア格子では波数 $(1/2, 1/2, 1/2)$ に Bragg ピークをもつ cubic-symmetric な磁気秩序が現れるが、ブリージング性が強い系の低

温相は、同じ波数点に Bragg ピークをもつものの、その磁気構造は non-cubic で、大きい四面体上のスピン配置に縮退が残ることが明らかとなった。この縮退により、長距離秩序でありながら残留エントロピーが有限に残るなど、ブリージングパイロクロア格子は、特異な性質を示す磁気秩序相を実現する舞台となることが分かった。

一方、スピン-格子カップリングが弱い領域では、 $J'/J=1$ の場合と同様の tetragonal-symmetric な波数 $(1, 1, 0)$ の磁気秩序が $0 < J'/J < 1$ の広い領域で実現し、これは対応するブリージングパイロクロア $\text{LiInCr}_4\text{O}_8$ ($J'/J \sim 0.1$) の中性子散乱の結果から得られた反強磁性相の磁気構造と同一である。通常のパイロクロア格子での結果と併せて、クロム酸化物においては Einstein phonon が磁気秩序形成に本質的な役割を果たしていることが明らかとなった。本研究内容は、Physical Review B 誌に掲載された。

(3) 三角格子反強磁性体における磁気励起と輸送現象

フラストレート磁性体の典型例である三角格子反強磁性体において、局所格子歪みとして bond phonon を考慮した場合、基底状態にスピンネマティック相が現れ、また、有限温度では Z_2 渦転移と呼ばれるトポロジカル転移が生じる。この Z_2 渦という特殊な渦が生じるとき、物理現象、特に輸送現象にどのような特徴が現れるのだろうか？ Z_2 渦転移は、格子歪みのない極限でもその存在が予言されており、本研究では、 Z_2 渦系のプロトタイプとして三角格子反強磁性体を対象に、線形応答理論の範囲内でスピン輸送・熱輸送の数値解析を行った。その結果、スピン伝導率の縦成分が Z_2 渦転移温度付近で急激な増大を示すこと、また、熱伝導率には顕著な温度依存性は見られないことが分かった。通常の渦転移である KT 転移を示すフラストレーションのない XY モデルにおいても、スピン伝導率の縦成分が KT 転移温度で発散的な増大を示すことも確認し、三角格子系の結果と併せて、トポロジカル転移とスピン伝導に強い相関があることが明らかとなった。本内容に関しては、現在、論文を執筆中である。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

- ① [Kazushi Aoyama](#) and Hikaru Kawamura, “Spin ordering induced by lattice distortions in classical Heisenberg antiferromagnets on the breathing pyrochlore lattice”, Physical Review B 誌, **99**, 144406 (2019) 査読有.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.144406>
- ② [Kazushi Aoyama](#) and Hikaru Kawamura, “Spin-Lattice-Coupled Order in Heisenberg Antiferromagnets on the Pyrochlore Lattice” Physical Review Letters 誌, **116**, 257201 (2016) 査読有.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.257201>

[学会発表] (計 10 件)

- ① [青山和司](#)、川村光、“2次元正方格子反強磁性体における相転移とスピン伝導” 日本物理学会第74回年次大会 (2019年3月14日、九州大学伊都キャンパス)
- ② [青山和司](#)、川村光、“2次元古典ハイゼンベルグ反強磁性体のスピン伝導・熱伝導” 日本物理学会2018年秋季大会 (2018年9月10日、同志社大学京田辺キャンパス)
- ③ [Kazushi Aoyama](#) and Hikaru Kawamura, “Effects of local lattice distortions on the spin ordering in Heisenberg antiferromagnets on breathing pyrochlore lattices” 9th International Conference on Highly Frustrated Magnetism (HFM 2018) (University of California, Davis, U.S.A., July 10, 2018)
- ④ [青山和司](#)、川村光、“パイロクロア反強磁性体におけるスピン-格子カップリングの効果” 第12回量子スピン系研究会 (2017年12月5日、大阪府箕面市 みのお山荘 風の杜)
- ⑤ [Kazushi Aoyama](#) and Hikaru Kawamura, “Lattice distortion effects in Heisenberg antiferromagnets on breathing pyrochlore lattices” Junichiro Kanamori Memorial International Symposium -New Horizon of Magnetism- (The University of Tokyo, Tokyo, Japan, September 27-29, 2017)
- ⑥ [青山和司](#)、川村光、“ブリージングパイロクロア反強磁性体における局所格子歪みと磁場効果” 日本物理学会2017年秋季大会 (2017年9月24日、岩手大学)

- ⑦ 青山和司、川村光、“ブリージングパイロクロア反強磁性体における局所格子歪みと磁気秩序” 日本物理学会第72回年次大会 (2017年3月19日、大阪大学)
- ⑧ 青山和司、川村光、“パイロクロア反強磁性体における局所格子歪みと磁場効果” 日本物理学会2016年秋季大会 (2016年9月14日、金沢大学)
- ⑨ Kazushi Aoyama and Hikaru Kawamura, “Spin-lattice-coupled ordering in Heisenberg antiferromagnets on the pyrochlore lattice” 8th International Conference on Highly Frustrated Magnetism (National Taiwan University, Taipei, Taiwan, Sep. 8, 2016)
- ⑩ Kazushi Aoyama and Hikaru Kawamura, “Spin ordering induced by local lattice distortions in Heisenberg antiferromagnets on pyrochlore lattices” Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2016) (Paul Scherrer Institut, Villigen, Switzerland, May 23, 2016)

[図書] (計 0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0件)

○取得状況 (計 0件)

[その他]

6. 研究組織

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。