



Title	モット転移近傍の反強磁性
Author(s)	吉森, 昭夫
Citation	大阪大学低温センターだより. 1978, 22, p. 6-7
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/8682
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

モット転移近傍の反強磁性体

基礎工学部 吉森昭夫（豊中 2344）

もう 20 年近くも昔の話になるが、「固体バンド理論の基礎と限界」という 2 年間続いた基礎物理学研究所の長期研究計画があった。この研究計画の成果は「やや限界の方に主力を注ぎすぎたきらい」があり、「モットの問題、non band conduction などに興味の焦点」があてられたと、適切にまとめられている。¹⁾ 実は私もその研究計画に基研の長期滞在者として参加し、限界の方にこだわった 1 人である。モットの問題を記述するもっとも簡単なモデルは所謂ハバードモデルということになる。（ハバードの論文はもう少し後で、その頃はそんなモデルの名前はなかったが、モデルとしては存在していた。）このモデルの示す種々の性質についての理解はその頃からみると全体として非常に大きい進歩をとげたというのはまちがいのないところである。

その頃と比較してあまり進歩がない部分もあるわけで、その 1 つにモット転移点近傍の磁性があげられる。転移点近傍といっても遍歴状態と局在状態があり、ともに話は簡単ではないけれど、ここでは局在状態の側を取り上げる。ハバードモデルで rigid な格子を仮定した場合、有限温度で局在状態から遍歴状態へのはっきりした転移があるかどうかは問題のあるところである。U/b (U は原子内クーロン積分、b はバンド巾) を局在極限 ($U/b \rightarrow \infty$) から遍歴極限 ($U/b \rightarrow 0$) へ変えたときに局在状態から遍歴状態へだらだらと変って行くというのがもっともらしい答の 1 つである。（そのときはモット転移は格子の変化をも考慮に入れて起る 1 次転移であるということになる。）今はこのことはあまり問題にしないことにして、ハバードモデルでいえば U/b の値はモット転移の領域にあるが、その中でも局在極限寄りのところを考えることにする。

そんな状態にあると思われる物質について詳しい実験研究がなされている例はそれ程多くはない。²⁾ 最近よく調べられたものにパイライト構造をもつ Ni_3S_2 の結晶がある（ Ni イオンは面心立方格子をつくる）。この結晶は圧力、 Ni の Co 、 Cu での置換、 S の Se での置換によって局在状態から遍歴状態へモット転移することが知られている。 T_N が $40 \sim 60\text{ K}$ の反強磁性体であるが、いくつかの著しい特徴的な性質を示す。温度を下げて行くと、まづ T_N で面心立方格子の第 1 種と呼ばれる反強磁性構造が出現する。第 1 種の構造を記述するフーリエ成分の波数ベクトルは同等なものが 3 個あるが、これはその 3 成分が重ね合った non-collinear な構造である。次に 30 K で 1 次転移を起し、第 1 種の構造に加えて第 2 種と呼ばれるスピン構造が現れる。この第 2 種の構造も第 1 種について上に述べたと同様な意味で non-collinear な構造をもち、全体のスピン構造はこの 2 つの構造を重ね合せたものになる。 30 K 以下では更にこの複雑な反強磁性構造に付随して弱強磁性が現れる。

ハバードモデルで考えると、局在極限からの展開として b^2/U の次数でハイゼンベルグ型の交換相互作用、 b^4/U^3 の次数でスピンの 4 次形式で表されるスピン間相互作用がえられる。このハイゼンベルグ型の相互作用がえられ、次に 4 次形式で表される相互作用が導かれるのはハバードモデルに限らず局在極限からの展開として一般的である。ハイゼンベルグ相互作用に加えてこの 4 次形式の相互作用を考慮することにより、上に述べた、 Ni_3S_2 でみられるような non-collinear な構造が現れること、

更に同等でない2種類のフーリエ成分が重ね合さった構造が起ることの2つは説明できる。このような展開が意味をもつのは今考えているようなモット転移近傍のところよりはもっと局在極限寄りのところではあるが、モット転移近傍で起ることがすでにこの領域で起るという意義はある。またその議論は平均場の近似を用いてなされているが、自由エネルギーの表式をもっと一般的な磁化のフーリエ成分についての展開と見做せばモット転移近傍でも成立すると考えられる。更に NiS_2 の30K以下で現れる弱強磁性もこの4次形式の相互作用で説明できる可能性がある。

局在極限からの展開では説明が難しいことは当然いくつかある。上に述べた同等でない2種類のフーリエ成分の重ね合せが起るためにはその2種類のスピン構造のエネルギーが接近している必要がある。面心立方格子で最近接及び第2近接スピン間のハイゼンベルグ相互作用を仮定した場合に（局在極限ではよい近似と考えられる。）安定なスピン構造はよく知られており、第1種の構造に接近したエネルギーをもつ構造は第2種の構造ではなく第3種（改良第1種）と呼ばれる構造である。

やはり局在極限からみればモット転移点の方に寄っていると思われる、パイライト構造をもつ反強磁性体 MnS_2 ， MnSe_2 ， MnTe_2 のスピン構造も興味がある。 MnS_2 は第3種の構造をもち、 MnTe_2 は第1種の構造をもつが、その間にある MnSe_2 は化学的単位胞の3倍の単位胞のスピン構造をもつと報告されている。この陰イオンが変るにつれてのスピン構造の変化、特に MnSe_2 のスピン構造もまた単純な最近接、第2近接スピン間相互作用モデルでは説明できない。

先に述べた4次のスピン間相互作用が関連して起ることとして、異方性エネルギーと4次のスピン間相互作用の大きさが同程度である場合にはこの2つのエネルギーの競合で non-collinear な構造の詳細が定る場合を考えられる。部分格子磁化の結晶主軸に対する方向が調べられているのは NiS_2 ， MnTe_2 についてであるが、特に MnTe_2 の場合には（第1種の non-collinear な構造をもつ）この方向が温度により変化するが、これが上に述べた競合と関連したものであるかもしれない。

NiS_2 は局在極限にあるとすれば Ni 当りのモーメントは $2\ \mu_B$ と期待される。実験的に見出された値は約 $1.2\ \mu_B$ であって、これはやはりモット転移近傍とすれば理解できることである。比熱の測定からえられる磁気的なエントロピーは、局在極限で期待される $R\ln 3$ に対して、もっと小さくなってしまおり $R\ln 3$ の $2/3$ 程度である。また Ni を Co で置換して偏歴反強磁性状態になったときでもこのエントロピーはそんなに大きい変化をしない。このことの理論的解釈も今のところ明かでない。

モット転移の絶縁体側の磁性について局在極限でみられない新しいことはまだあるかもしれない。またこの磁性は最近興味をもたれている固体 ^3He の核反強磁性と似た性格のところがある。この領域をもう少し或は大いに正面から理論的に攻めるのは勿論大きい課題である。

1) 基礎物理学の進展(基研15周年シンポジウム)(1969)166.

2) 以下それぞれの引用は省略するが、文献は例えば小川信二、固体物理11(1977)657. を参考されたい。