

## 論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博士（理学）	氏名	河野 佑紀
学位授与の要件	学位規則第4条第①・2項該当		
論文題目			
Magnetic Structures of Itinerant Electron Systems on the Extended Spatially Completely Anisotropic Triangular Lattice (拡張異方的三角格子上の遍歴電子系の磁気構造)			
論文審査担当者			
主査	教授	嶋原 浩	印
審査委員	教授	鬼丸 孝博	印
審査委員	教授	松村 武	印
審査委員	准教授	多田 靖啓	印
〔論文審査の要旨〕			
<p>本論文は、拡張された空間異方的三角格子上の遍歴電子系の基底状態の磁気構造を、ハバード模型と平均場近似に基づき、理論的に調べたものである。三角格子反強磁性体は、スピン配置の幾何学的フラストレーションに起因する興味深い現象から、近年の重要な研究対象の一つと考えられている。フラストレーションは三角格子上の三つの反強磁性交換結合定数が等しくなるときに最大となるが、現実の物質ではこれらの結合定数が異なることが多く、その考慮が重要になることがある。そのような格子は空間異方的三角格子と呼ばれるが、本研究で扱う拡張された空間異方的三角格子では、2種類の三角形が交互に並び、結合定数は一般には6個となる。このような系は準2次元有機伝導体<math>\lambda</math>-(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub> (BETSはbis(ethylenedithio)tetraselenafulvaleneの略。)などで実現しており、本研究ではこの物質を主要な対象物質としているが、将来の類似物質への幅広い適用も考慮し、パラメーター空間を広げて計算している。</p> <p><math>\lambda</math>-(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub>は、BETS分子上の遍歴<math>\pi</math>電子とFeCl<sub>4</sub>アニオンのもつ局在3dスピンを磁気自由度としてもつ複合反強磁性体で、この物質と類似の関連物質を含む物質群は、超伝導及び磁性に関する興味深い現象を示すことから、近年盛んに研究されている。<math>\lambda</math>-(BETS)<sub>2</sub>FeCl<sub>4</sub>については、この物質の発見後の初期の研究では、磁気構造を支配する相互作用はスピンの長さの大きい3dスピン (<math>S=5/2</math>) 間の相互作用と考えられていたが、その後の研究により、遍歴<math>\pi</math>電子間の相互作用であることが明らかになっている。本論文ではこの新しい知見に基づいて、3dスピンをもたない単独の遍歴<math>\pi</math>電子系の安定な磁気構造を調べている。実験的には約8.3 K以下では副格子を二つもつ反強磁性秩序状態であることがわかっているが、単結晶が極めて小さいため、現時点では詳しい磁気構造は明らかになっていない。この問題に対し、古典スピン系での先行研究により、<math>\uparrow</math>スピンと<math>\downarrow</math>スピンの2次元格子上で交互に並ぶネール状態 (Néel-<math>(\pi, \pi)</math>状態と呼ぶ) と<math>\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow</math>が繰り返し並ぶuudd状態が有力であること、ならびに、uudd状態が2種類の三角形の空間異方性の</p>			

インバランスが大きいときに安定になることが、理論的に明らかになっているが、スピン系での研究には、この物質が量子臨界点近傍にあるという事実（本論文の第2章で説明されている理論によって明らかになった）を考慮できないという問題がある。この事実を考慮した遍歴電子模型でも同様の結果が得られるか否かを確認することも本論文の目的の一つである。uudd 相は固体  ${}^3\text{He}$  やペロブスカイト絶縁体  $\text{HoMnO}_3$  などで実現していることが指摘され理論的にも研究されているが、これらの系では4体相互作用や強磁性的相互作用に起因すると考えられているのに対し、本論文の系では、運動交換相互作用によって比較的簡単に機構が説明できる反強磁性的相互作用のみで実現するという特徴がある。

以下、本論文の各章の内容について説明する。

第1章は背景と目的の章である。まず、拡張された空間異方的三角格子の定義と特徴が説明され、この格子の特徴である2種類の三角形の空間異方性のインバランスを数値的に表すパラメーター  $r_{\text{imb}}$  が定義されている。次に  $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{FeCl}_4$  に対する実験及び理論の先行研究がまとめられ、拡張された空間異方的三角格子に帰着するモデル化が説明されている。最後に上述の目的が述べられている。

第2章では、混晶系  $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{Fe}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Cl}_4$  における比熱と副格子磁化を温度  $T$  及び Fe の濃度  $x$  の2変数関数とみたときに成立するスケーリング関係式の理論が説明されている。スケーリング関係式は先行研究によって実験的に発見されたものであるが、平均場近似や乱雑位相近似に基づかない一般論でこれが説明できることが示されている。また同時に、 $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{FeCl}_4$  系のオンサイトクーロン相互作用の結合定数  $U$  が常磁性状態と反強磁性状態の境界の値  $U_c$  に近いこと、すなわち量子臨界点近傍にあることが示されている。

第3章では、拡張された空間異方的三角格子上の遍歴電子系の基底状態の磁気構造が調べられている。先行研究の理論的・実験的結果から、五つのコリニアな反強磁性状態の可能性を考慮した平均場近似の定式化が示され、これに基づいた数値計算の結果が示されている。その結果、まず、 $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{FeCl}_4$  に妥当なモデルパラメーターの値の二つの候補に対して、それぞれ Néel- $(\pi, \pi)$  状態と uudd 状態が安定であることが明らかにされた。次にパラメーター領域を広げた  $U\text{-}r_{\text{imb}}$  平面上の磁気相図が求められ、Néel- $(\pi, \pi)$  相、uudd 相、常磁性相の自由エネルギーが等しくなる三重点が存在することが明らかにされた。また、三重点の付近では全ての相転移が1次転移であるが、三重点から大きく離れると反強磁性相と常磁性相の間の相転移が2次転移に変化することも明らかにされた。また、古典スピン系と同様に、uudd 相が2種類の三角形の空間異方性の違いが大きいときに安定であることが確認された。

第4章では、以上の研究成果が総括され、将来の研究の方向が議論されている。

以上のように、本論文の研究は、数多くの研究の対象となっている重要物質の磁気構造の候補を明らかにしただけでなく、近年の重要研究課題の一つである三角格子反強磁性体の理論を発展させており、その学術的な意義は大きい。従って、本論文の著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な能力と実績を有するものと審査委員全員の一致により認める。

備考 審査の要旨は、1,500字程度とする。