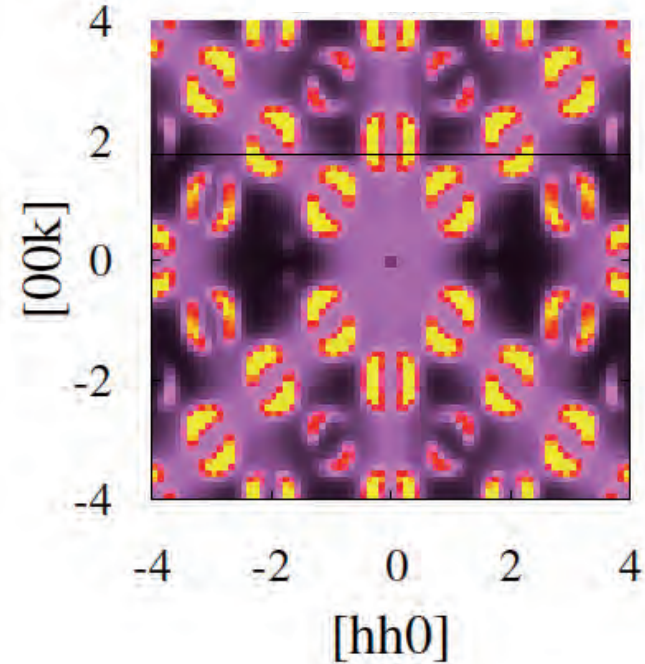
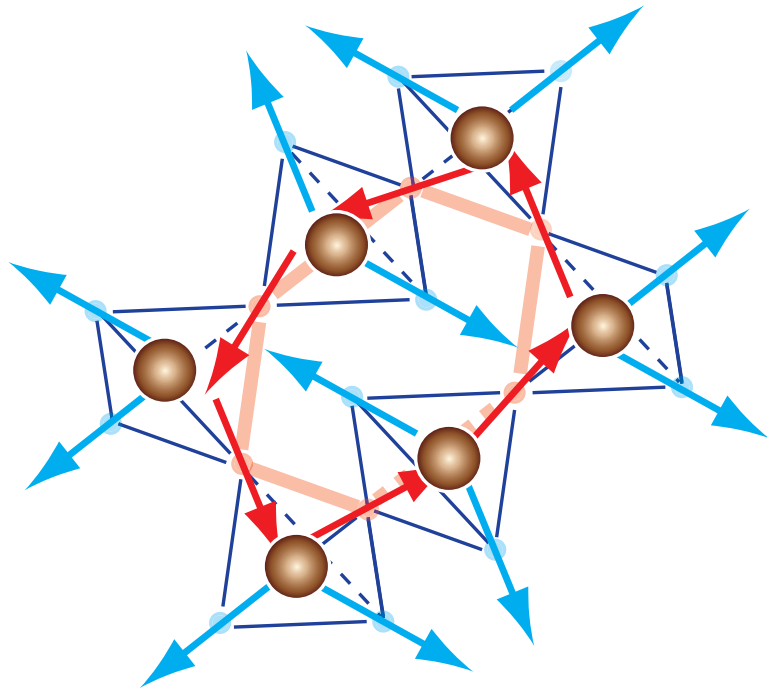


フラストレート格子上の伝導電子系



Masafumi Udagawa

Dept. of Physics, Gakushuin University

Mar. 8, '16 @ 統計物理学懇談会 in Gakushuin University

Reference

M. U., L. D. C. Jaubert, C. Castelnovo and R. Moessner, arXiv:1603.02872

Outline

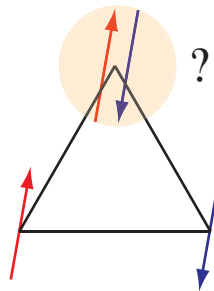
- I. Introduction: 幾何学的フラストレーション系
 - 基底状態の大規模縮退と残留エントロピー
 - トポロジカル秩序と分数励起

- II. 伝導スピναイス系の分数励起ダイナミクス
 - $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ と自発ホール効果
 - 伝導スピναイス系における “Like-charge attraction”
 - モノポールリング形成と物理的帰結

- III. まとめ

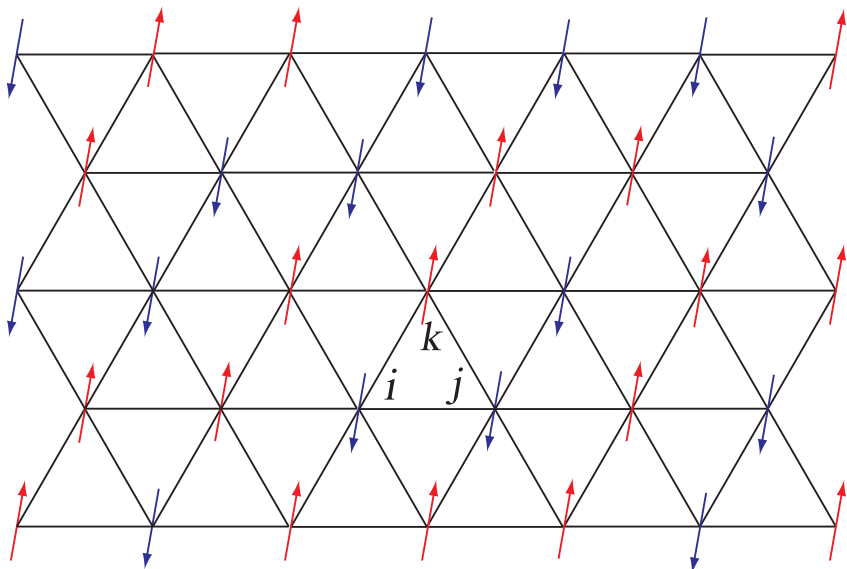
Introduction

幾何学的フラストレーション: 三角格子反強磁性 Ising 模型



- 三角格子上反強磁性 Ising 模型 ($J > 0$)

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma_j = \pm 1) \\ &= \frac{J}{4} \sum_{\Delta \& \nabla} (\sigma_i + \sigma_j + \sigma_k)^2 + \text{Const.}\end{aligned}$$



- 残留エントロピー (Wannier)

$$S = 0.323k_B/\text{spin} \quad (\text{NOT } 0.338 !)$$

幾何学的フラストレーション: スピンアイス

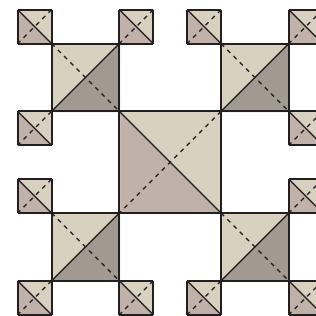
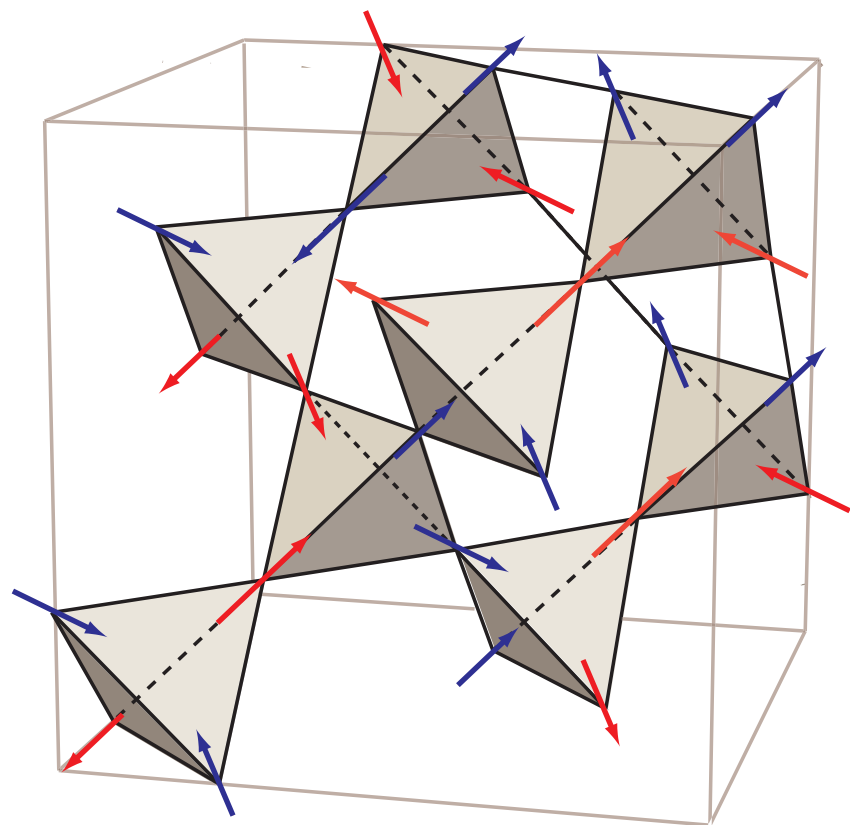
- アイスルール: 2-in 2-out

- 残留エントロピー (Ramirez)

測定値: $0.229k_B/\text{spin}$

- Pauling の近似値 (\simeq Bethe 近似)

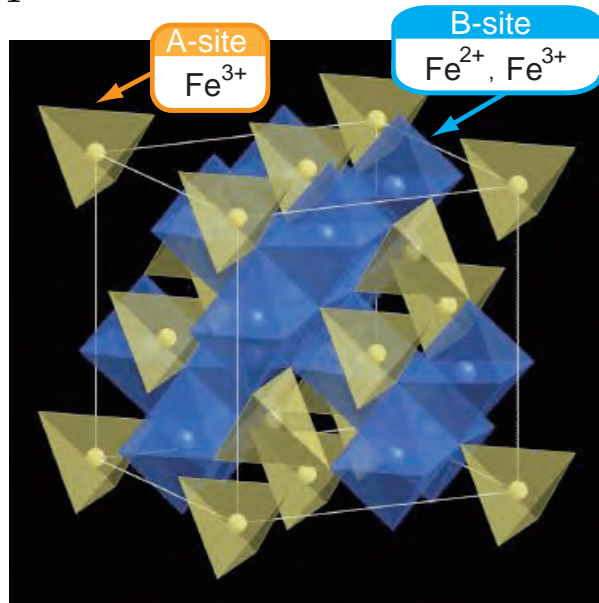
$$S_{\text{Pauling}} = \frac{k_B}{2} \log \frac{3}{2} \simeq 0.203k_B/\text{spin}$$



$\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

伝導電子系のフラストレーション: Fe_3O_4

Fe_3O_4



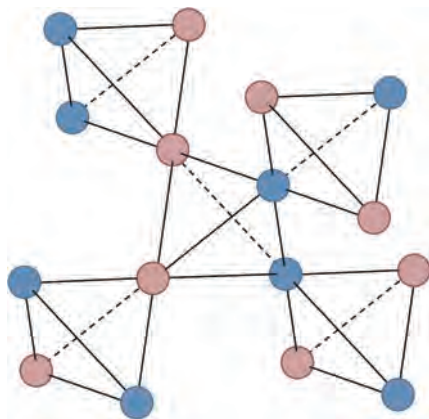
- $T_c = 120\text{K}$ における電荷整列転移 (Verwey)

- $T_c \ll$ クーロンエネルギー ($1\text{eV} \sim 10^4\text{K}$)

→ 電荷アイス-電荷秩序転移 (Anderson)

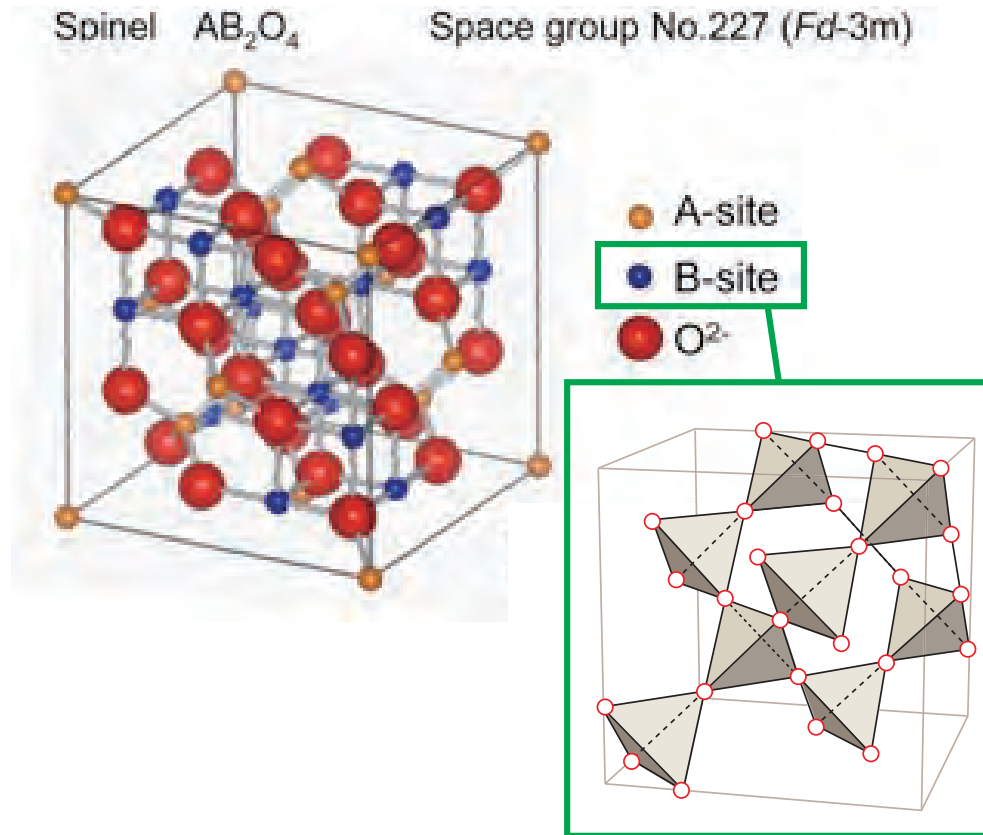
$$T_c \sim \Delta E / \Delta S$$

B-site spinel

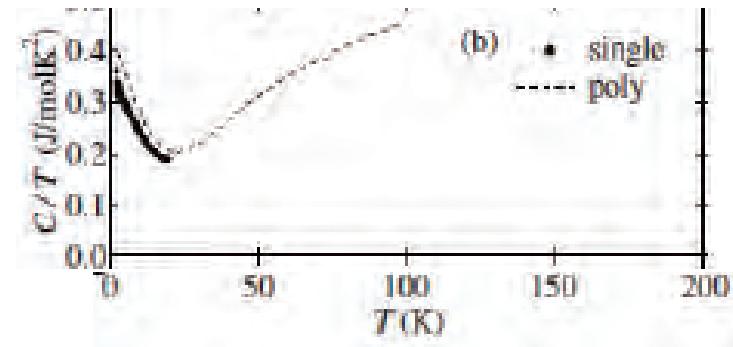


伝導電子系のフラストレーション: 重い電子挙動- LiV_2O_4

LiV_2O_4



Specific heat C J. Kondo et al. (1999)
C. Urano et al. (2000)

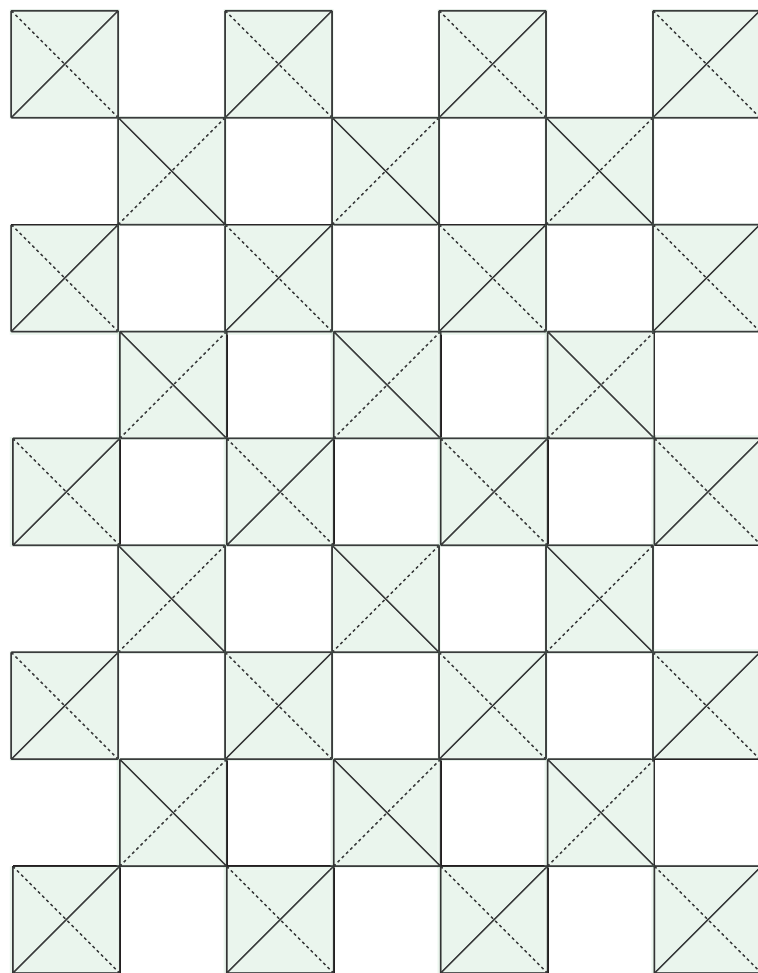


$$\gamma = C/T \propto m^*$$

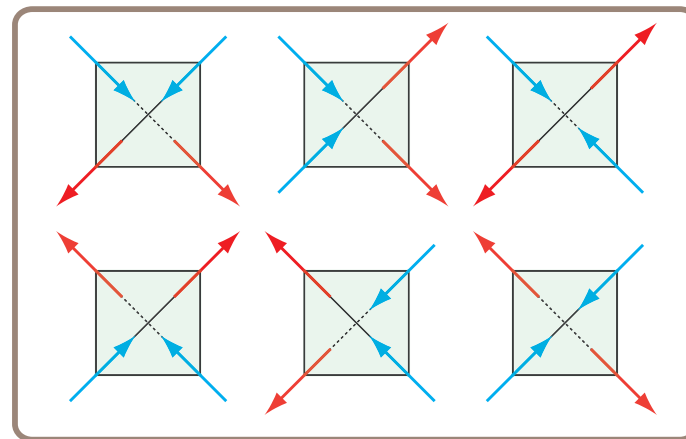
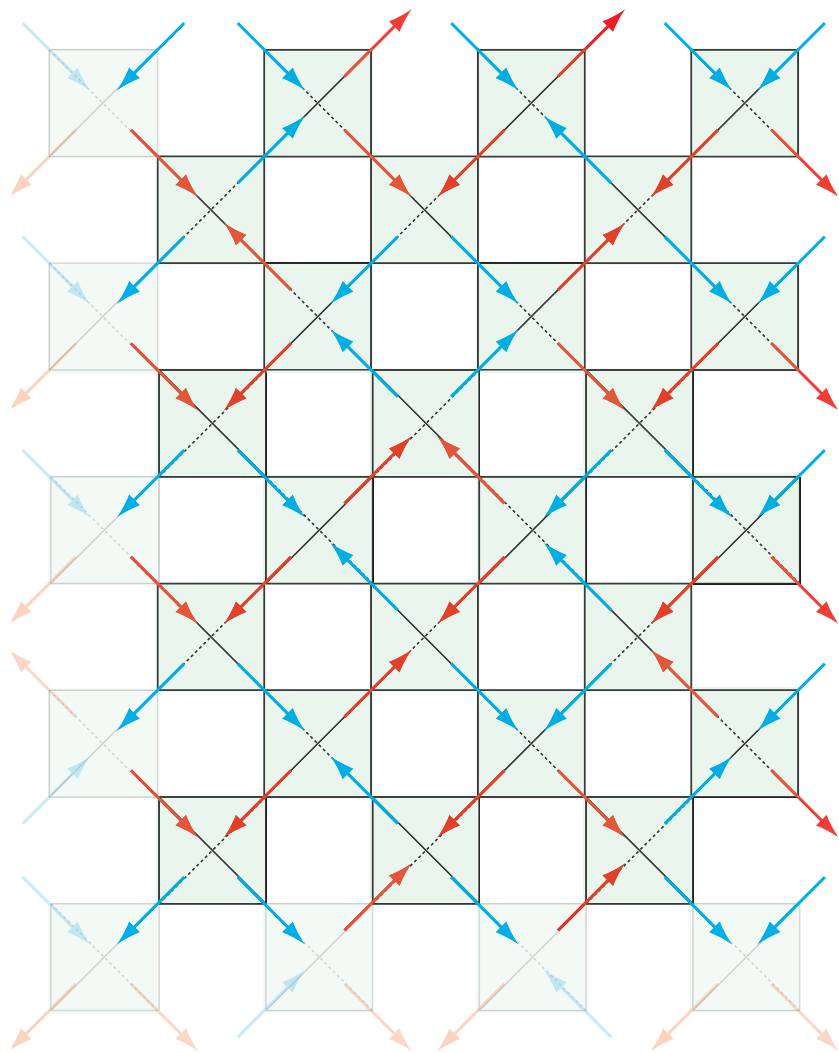
$$S = \int^T \frac{C}{T} dT \sim \gamma T$$

$$m^* = 200 m_e$$

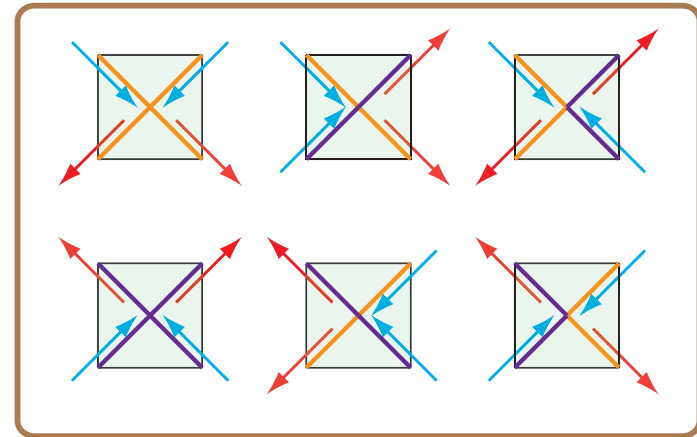
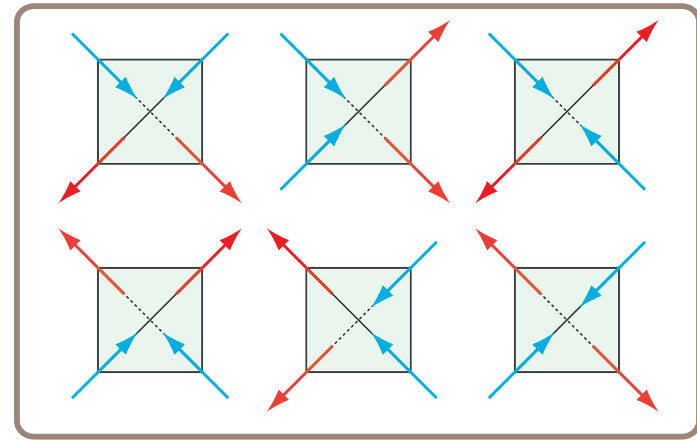
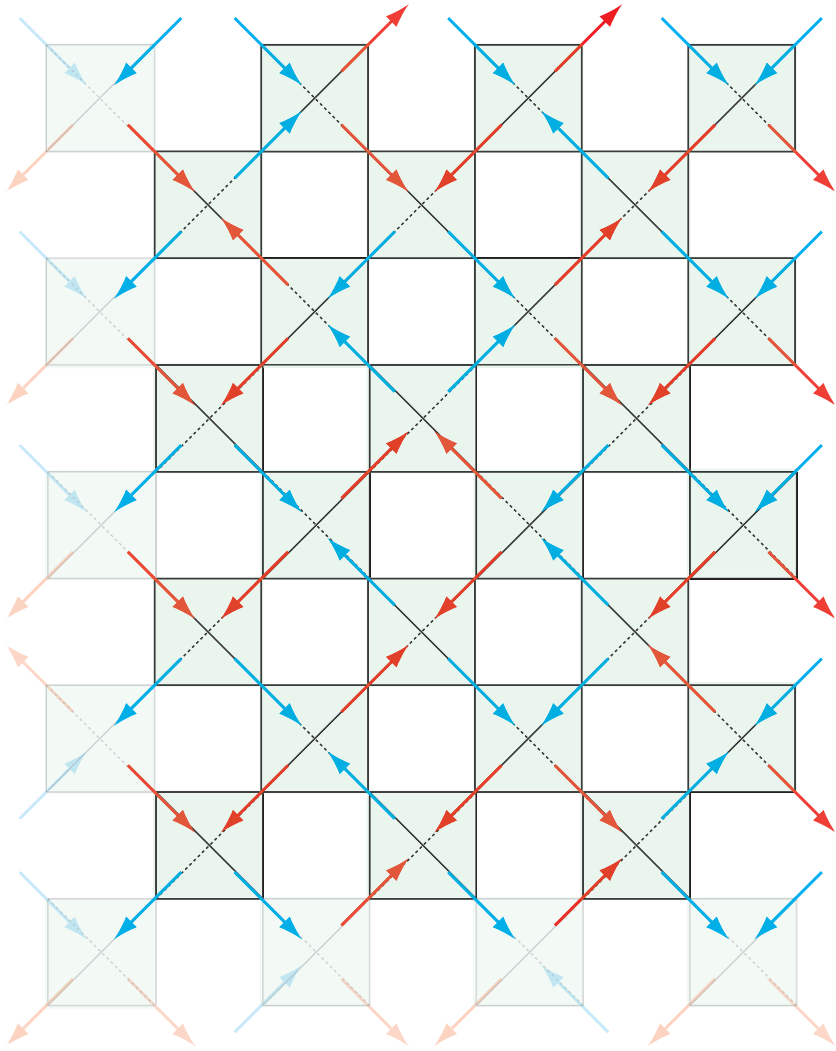
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



スピンのトポロジカル秩序と分数励起



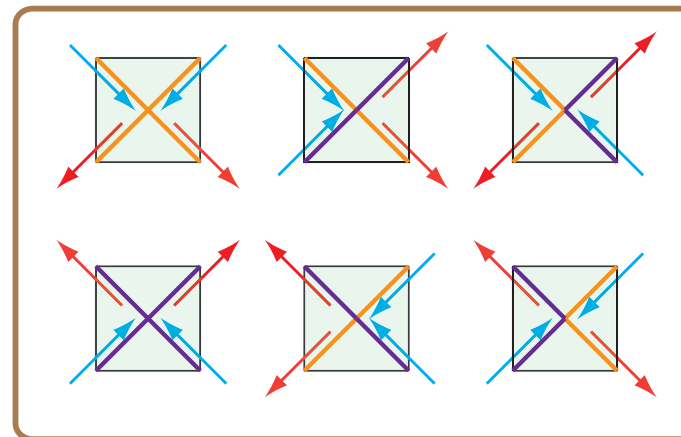
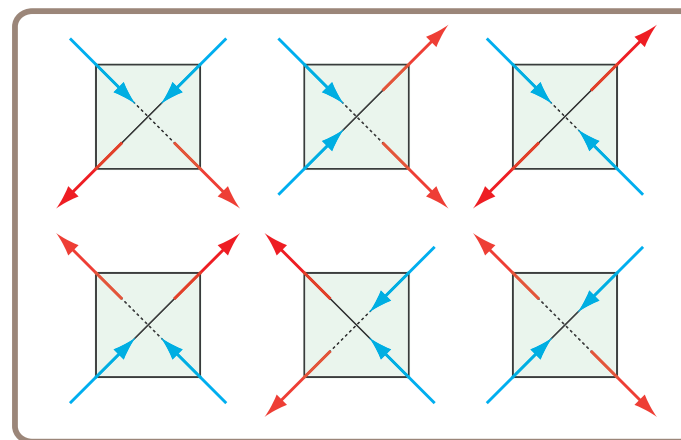
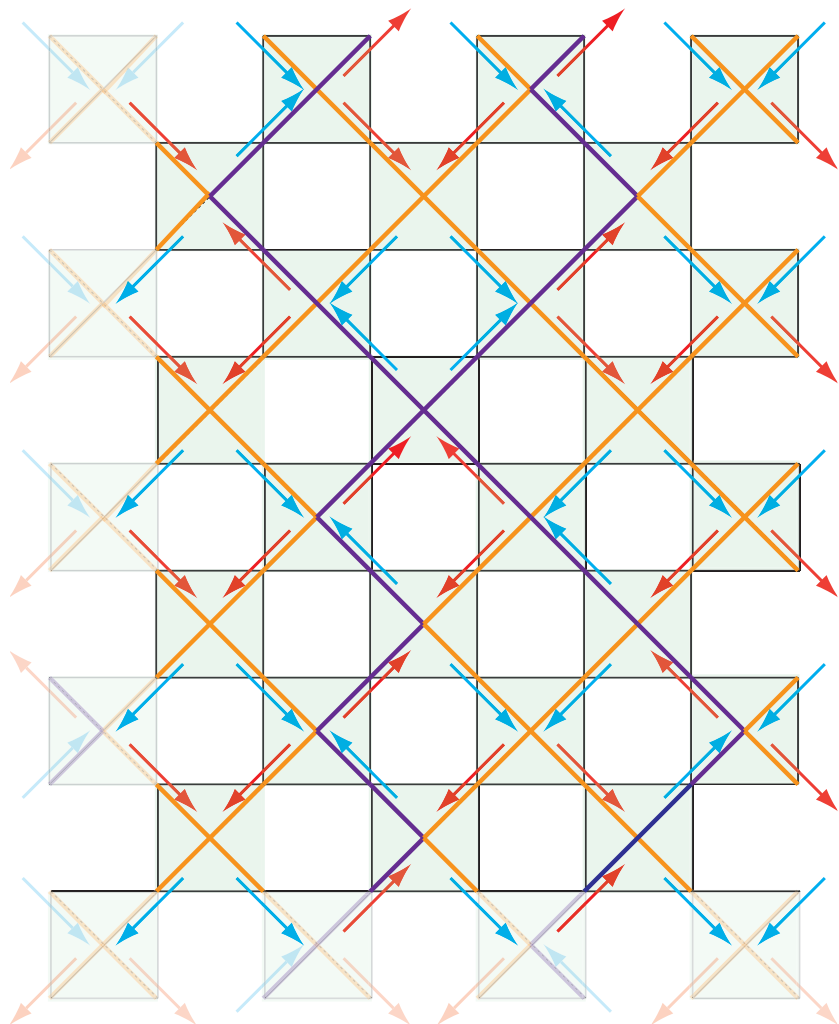
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---} \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---} \text{---})$$

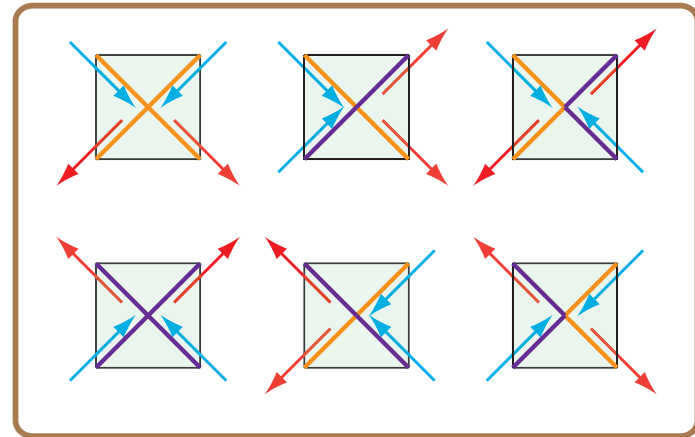
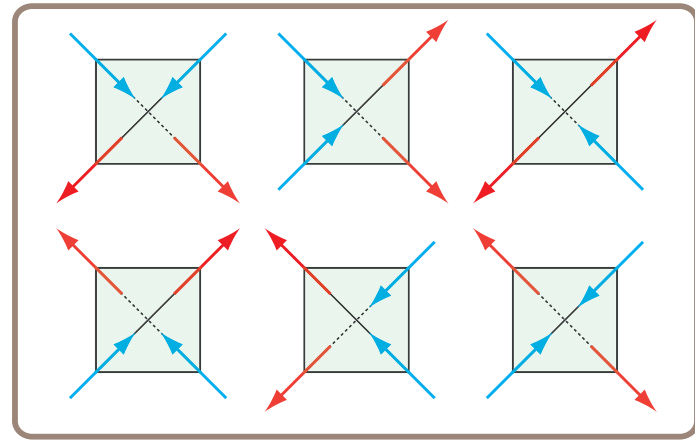
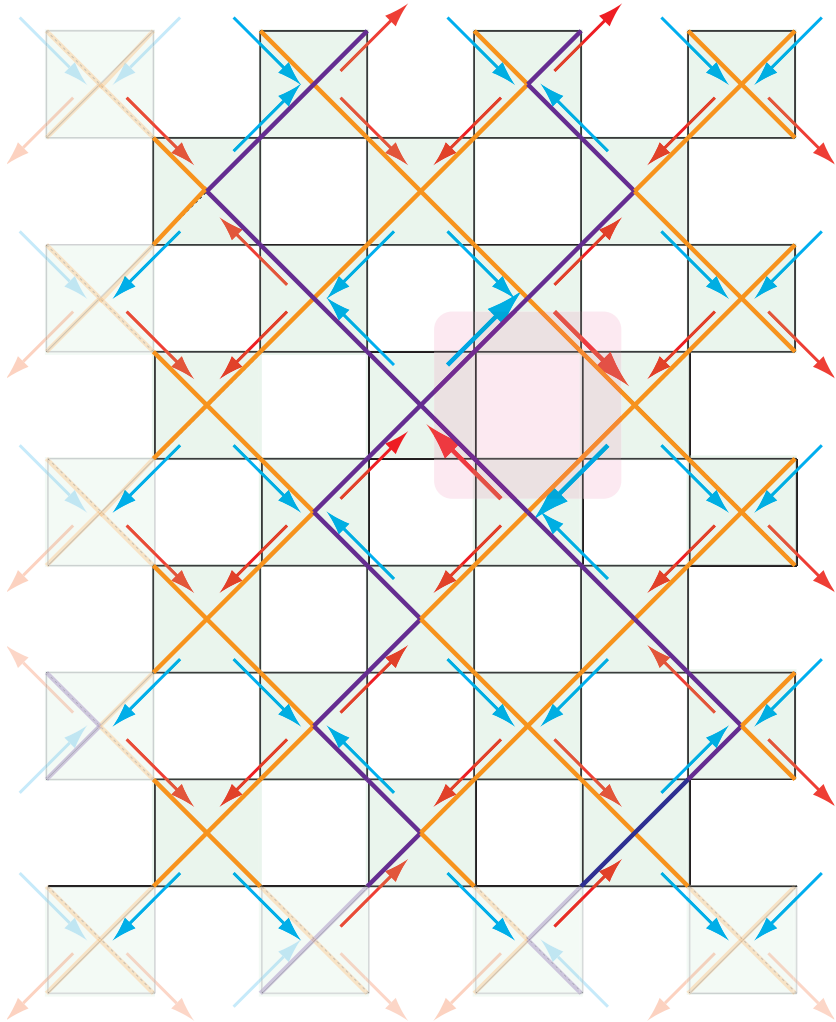
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

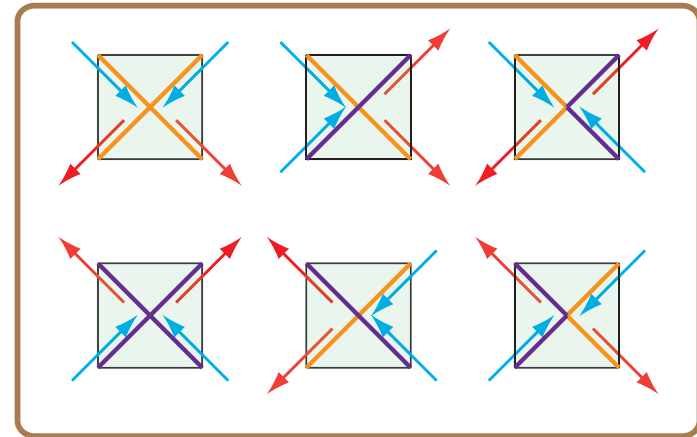
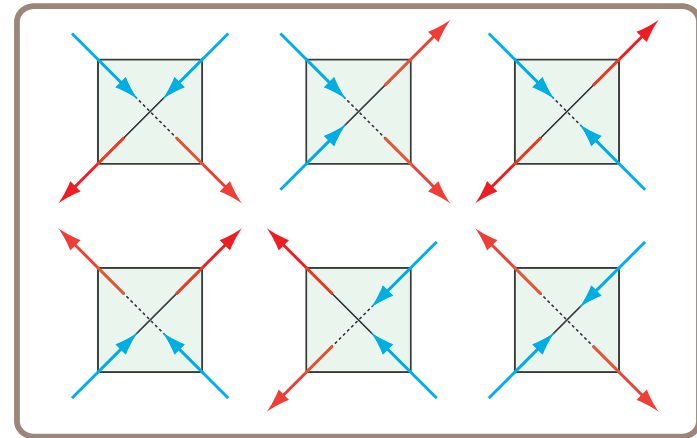
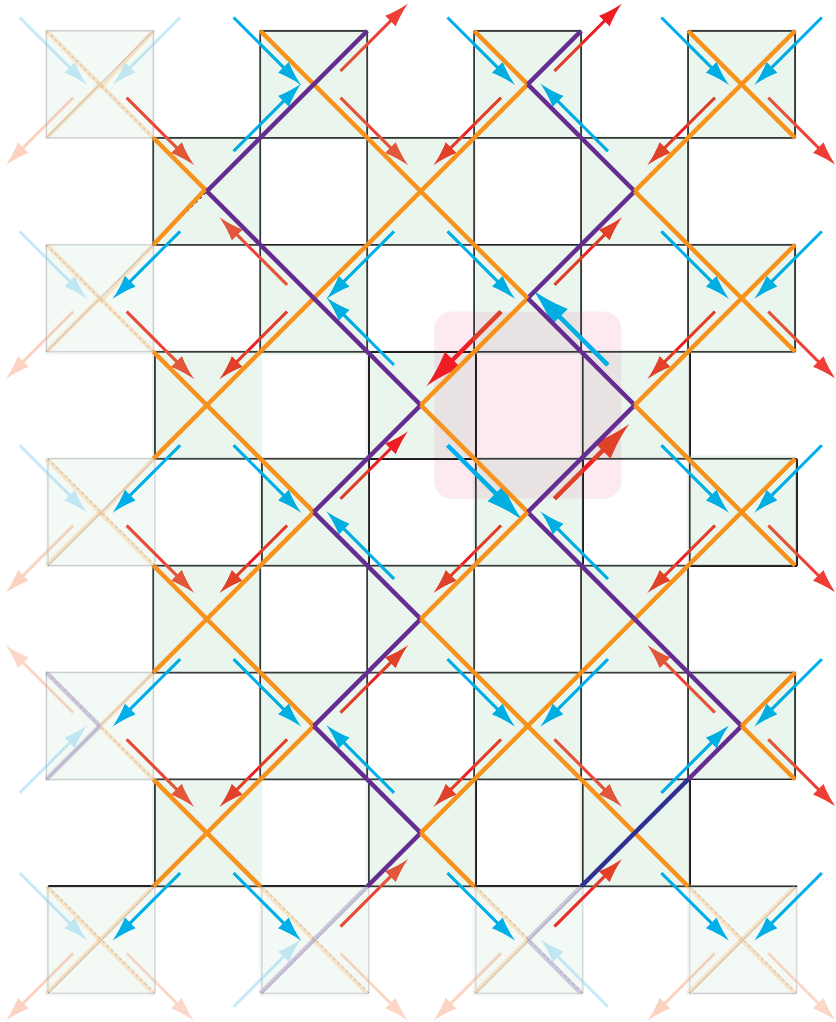
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

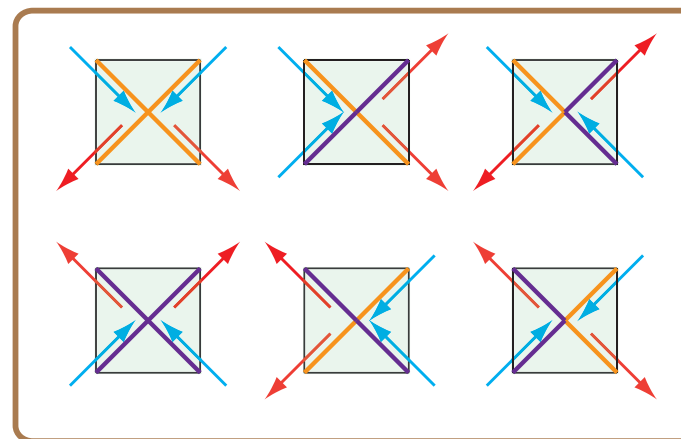
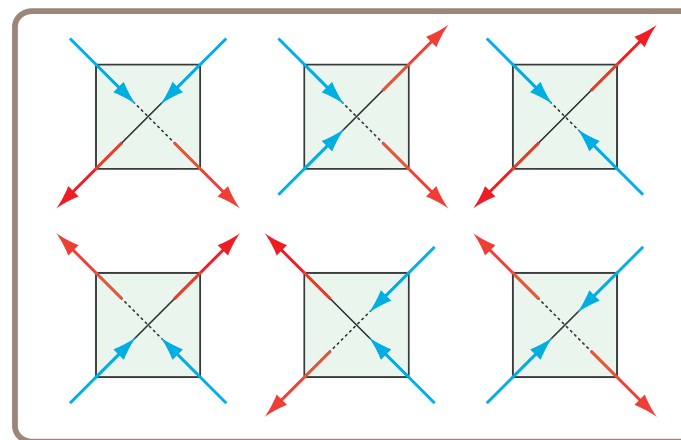
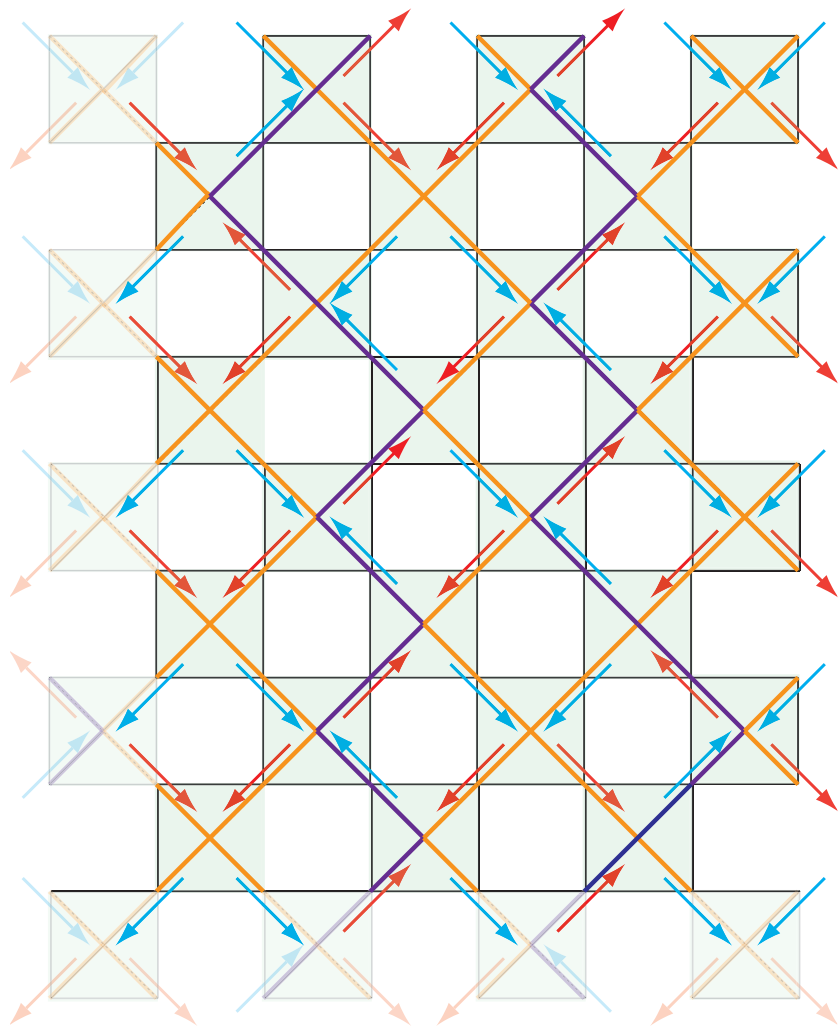
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

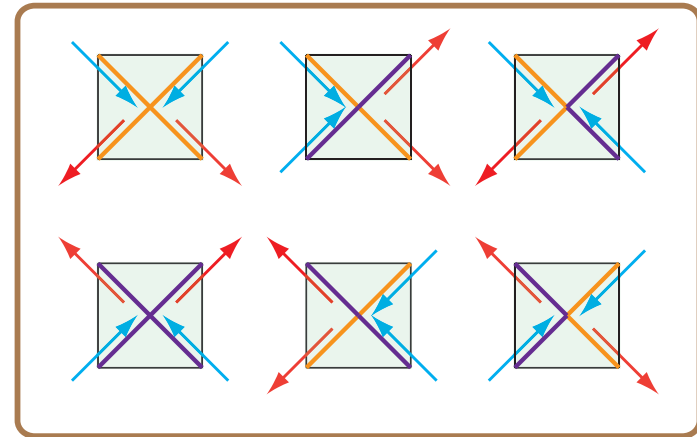
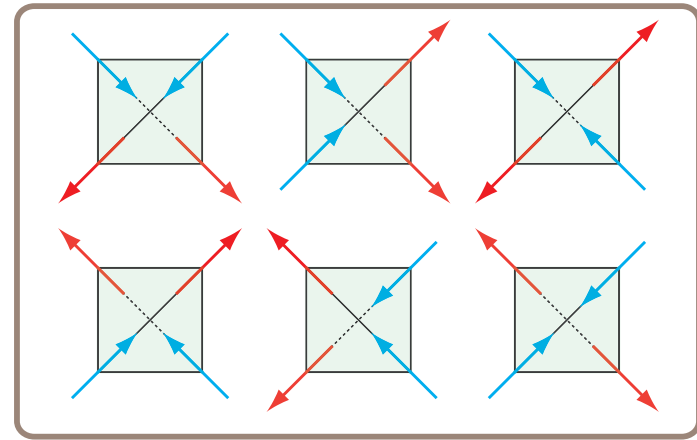
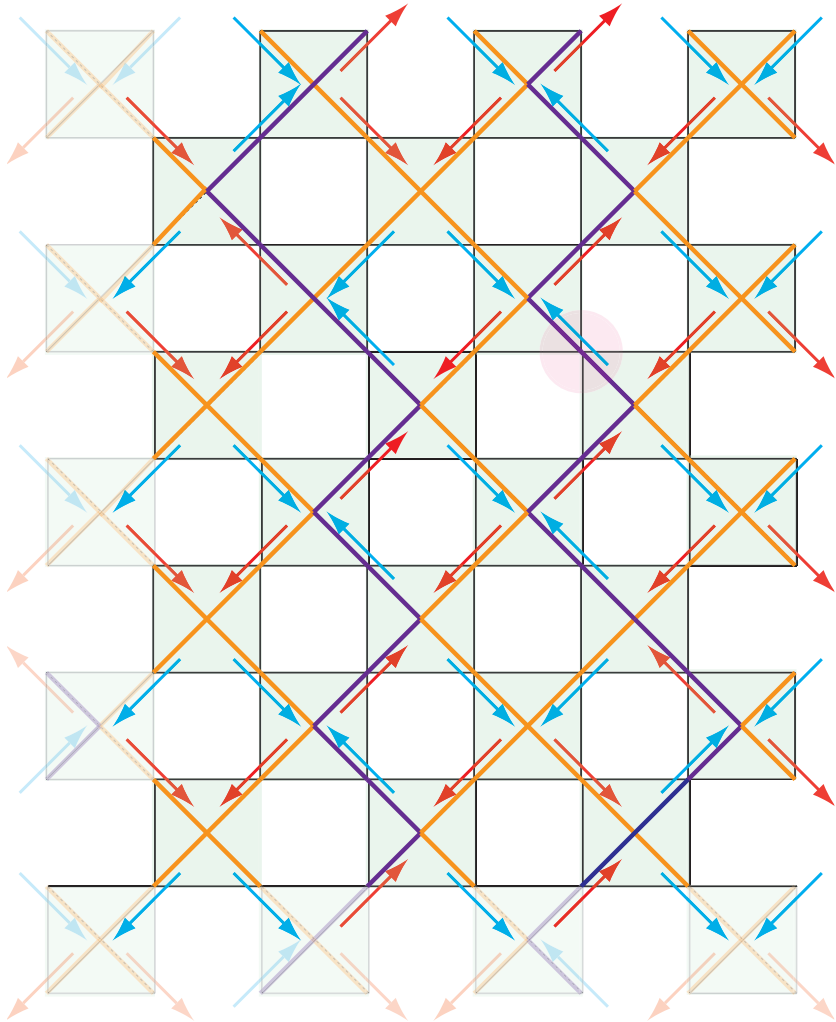
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

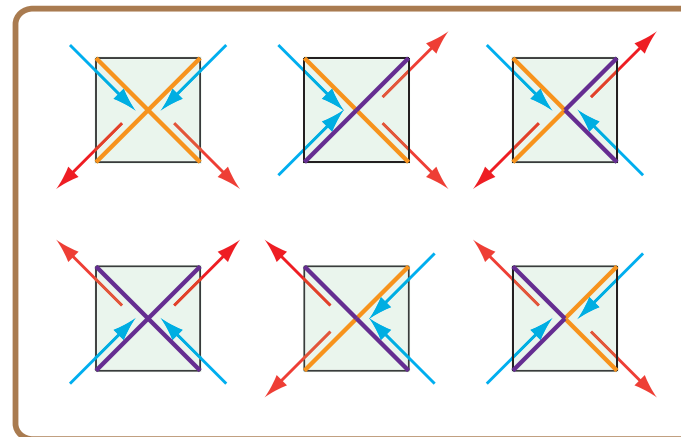
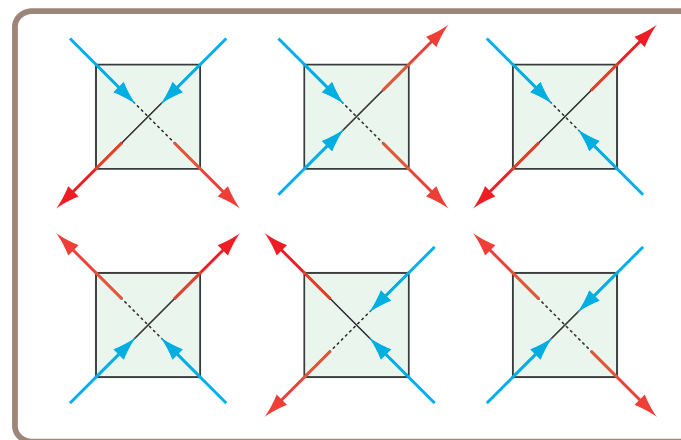
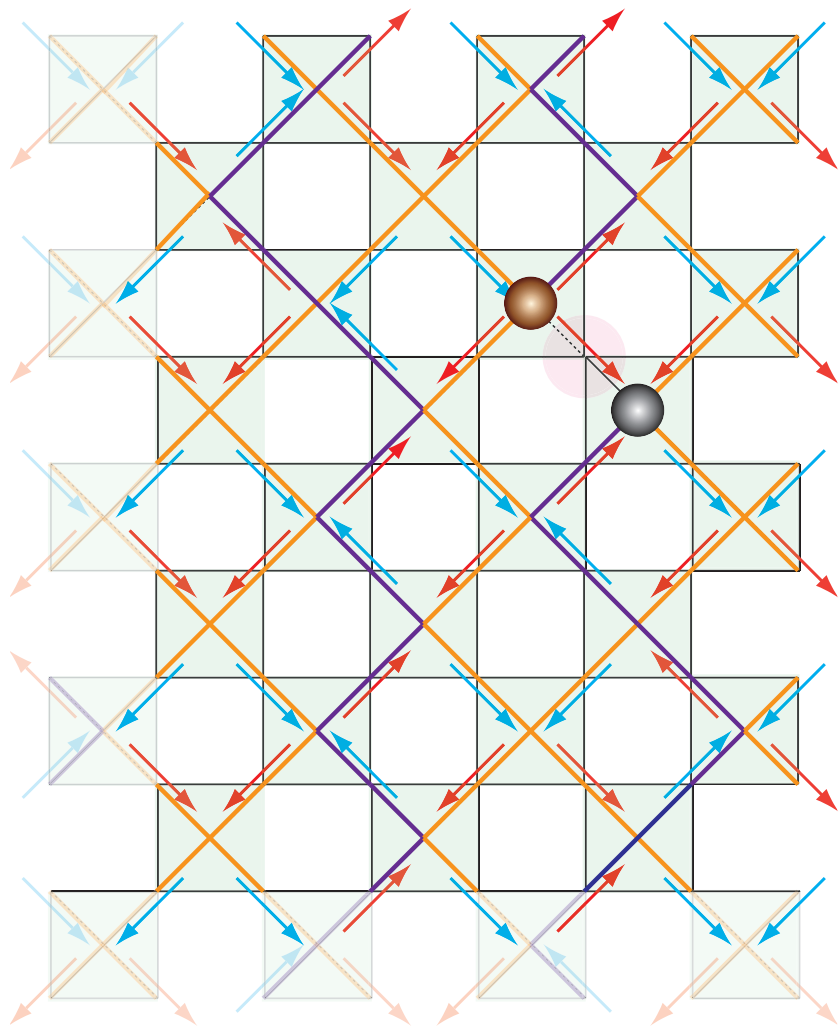
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

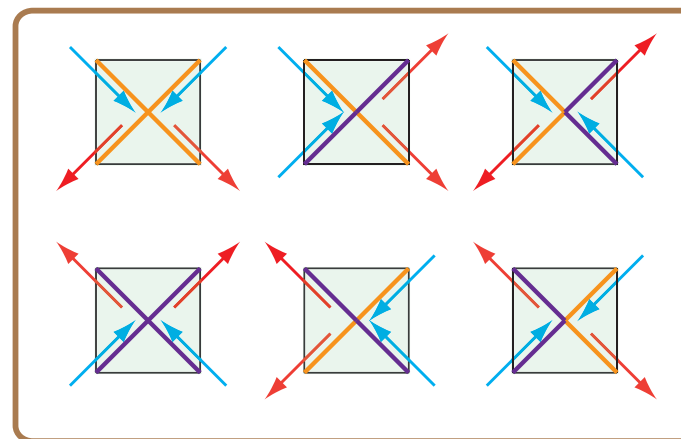
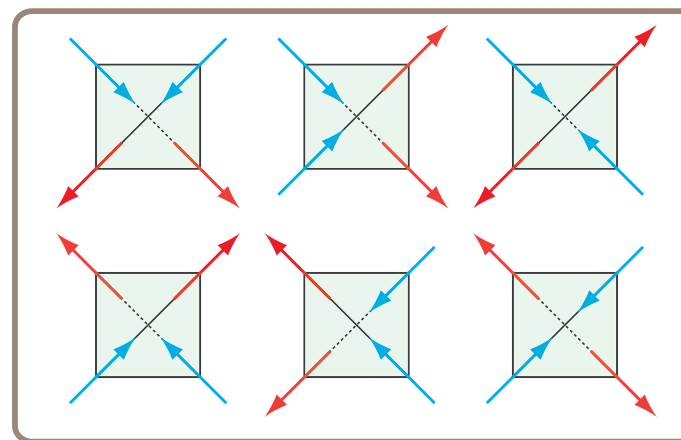
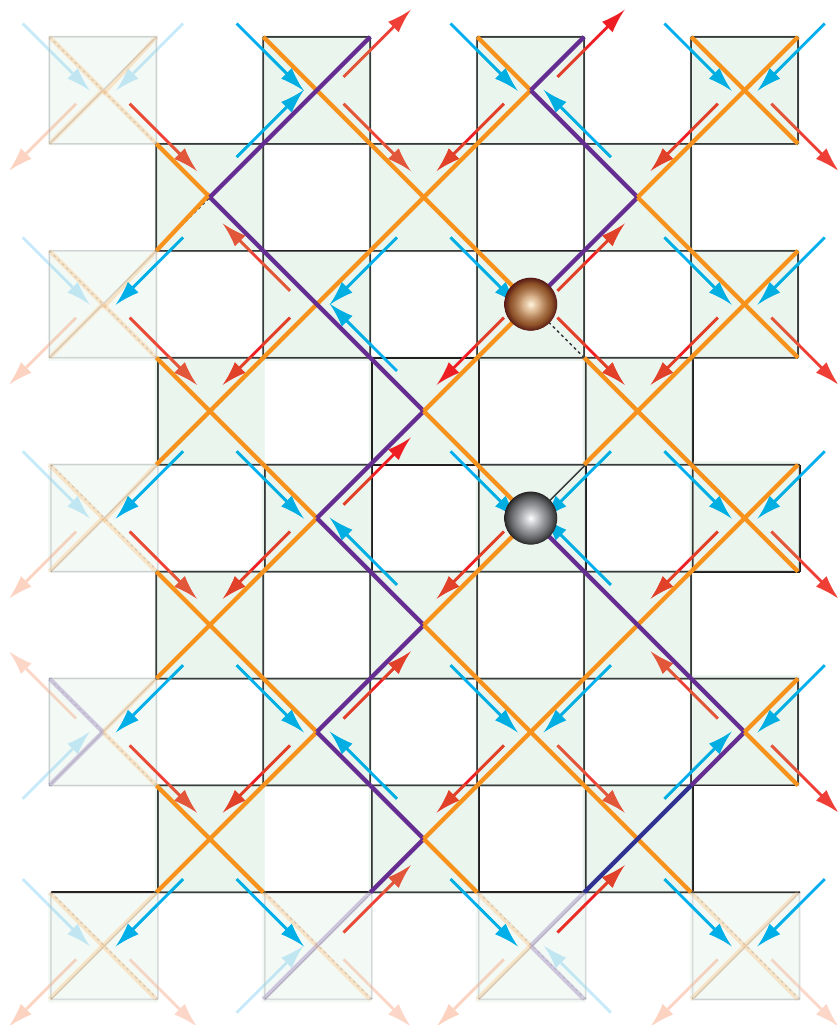
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{purple}) - (\# \text{ of } \text{orange})$$

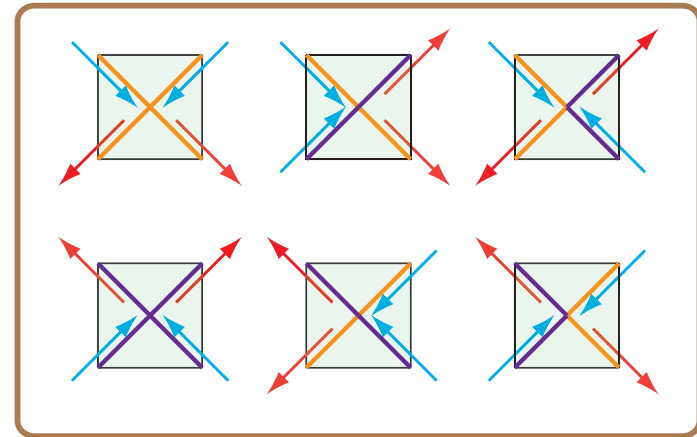
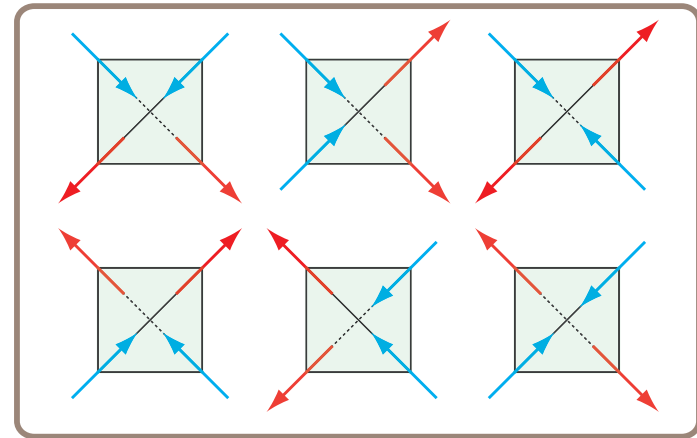
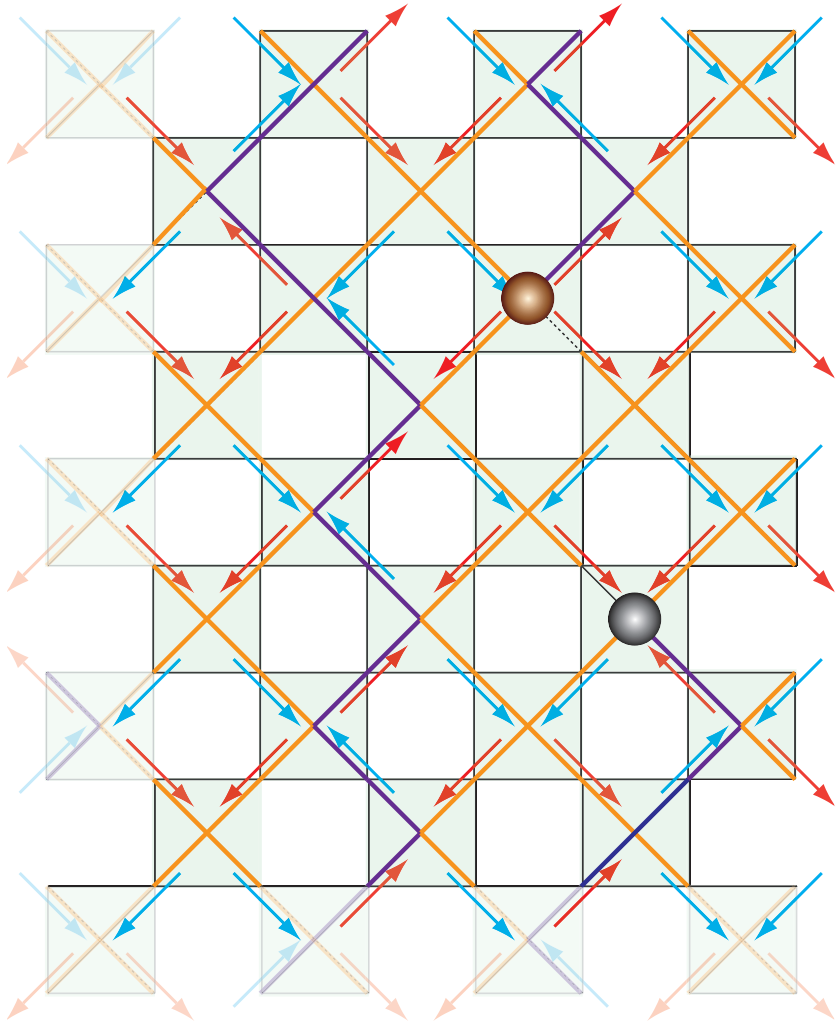
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{purple}) - (\# \text{ of } \text{orange})$$

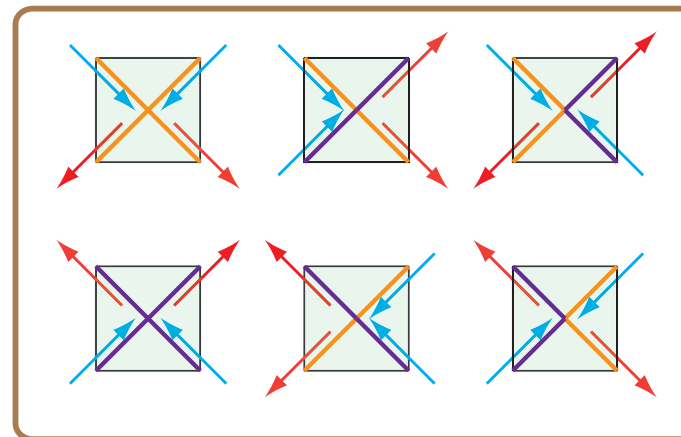
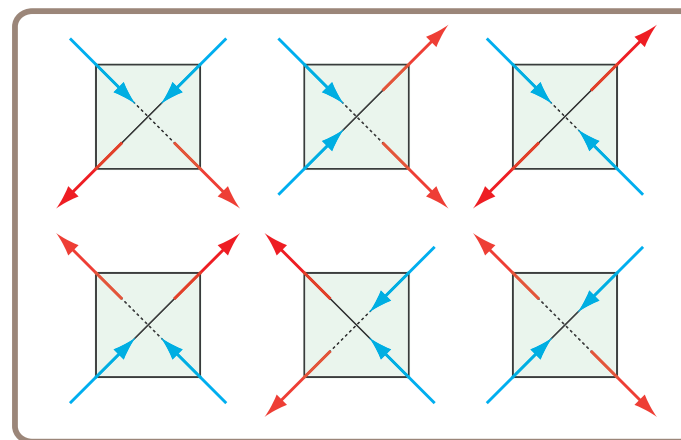
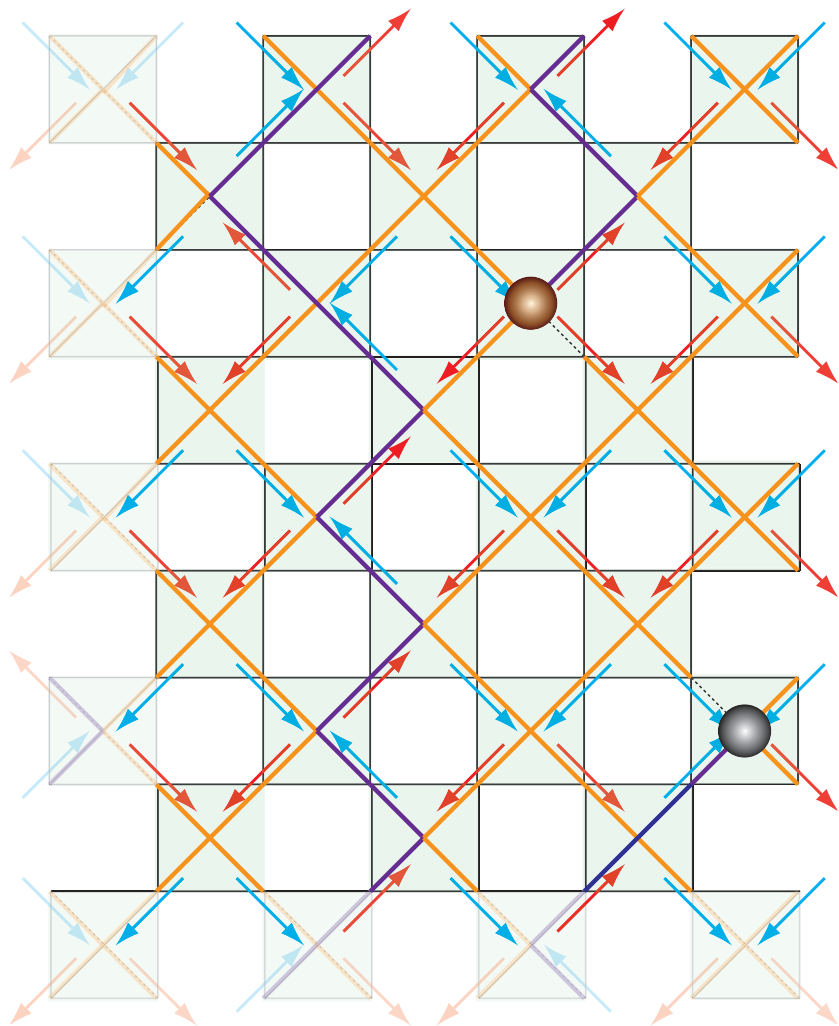
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{purple}) - (\# \text{ of } \text{orange})$$

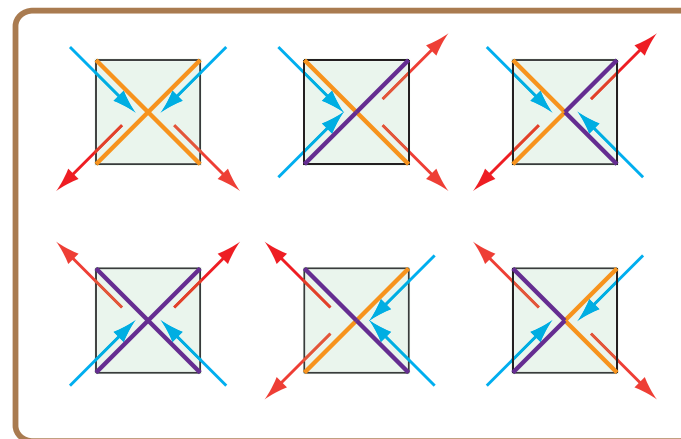
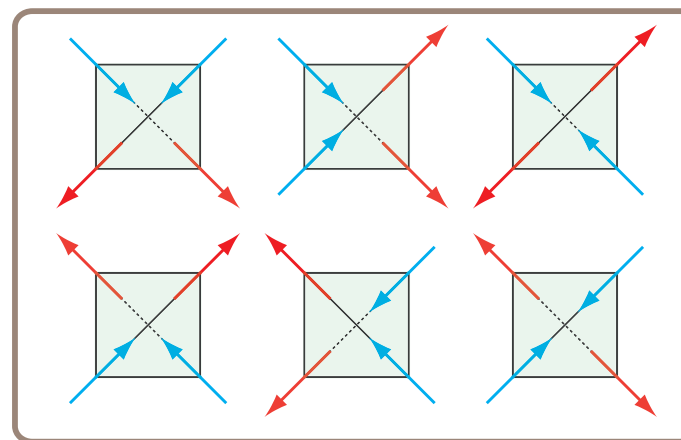
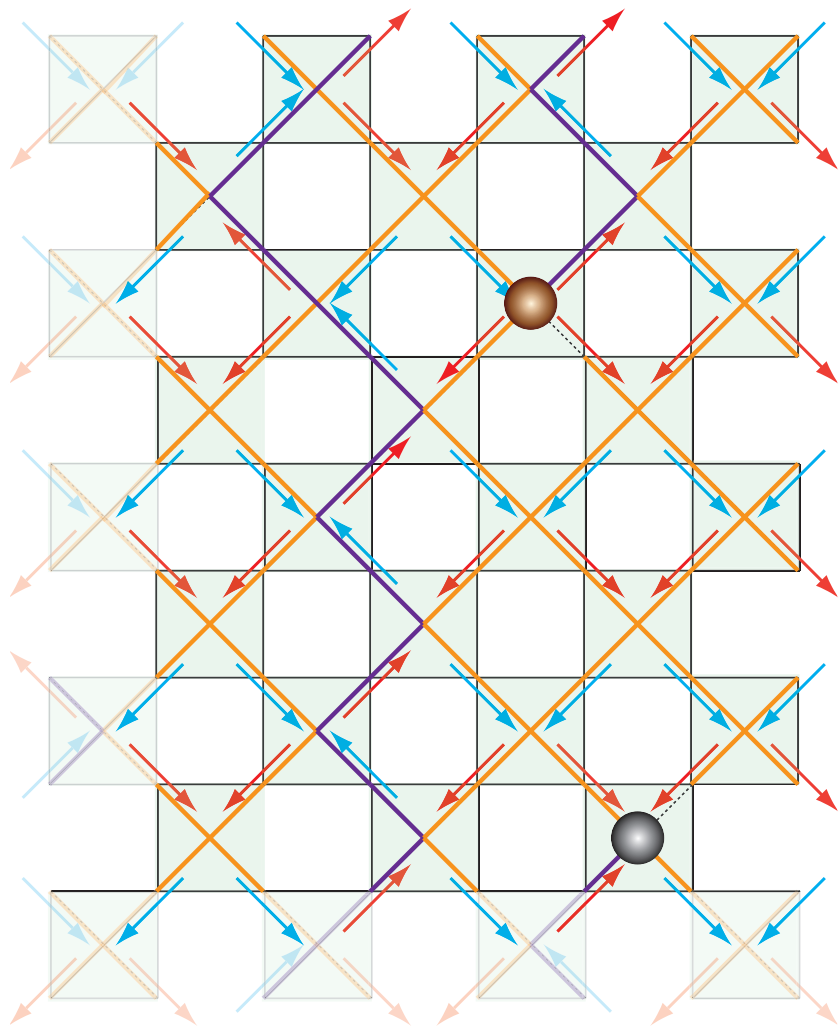
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{purple}) - (\# \text{ of } \text{orange})$$

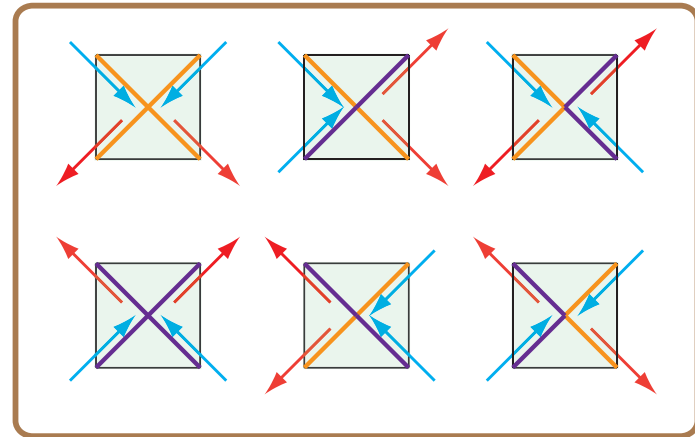
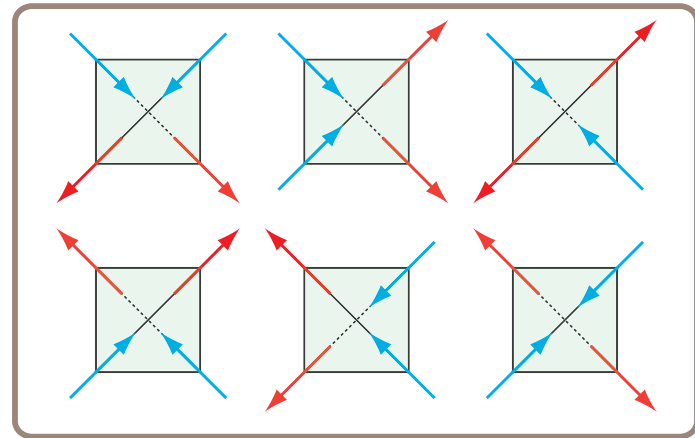
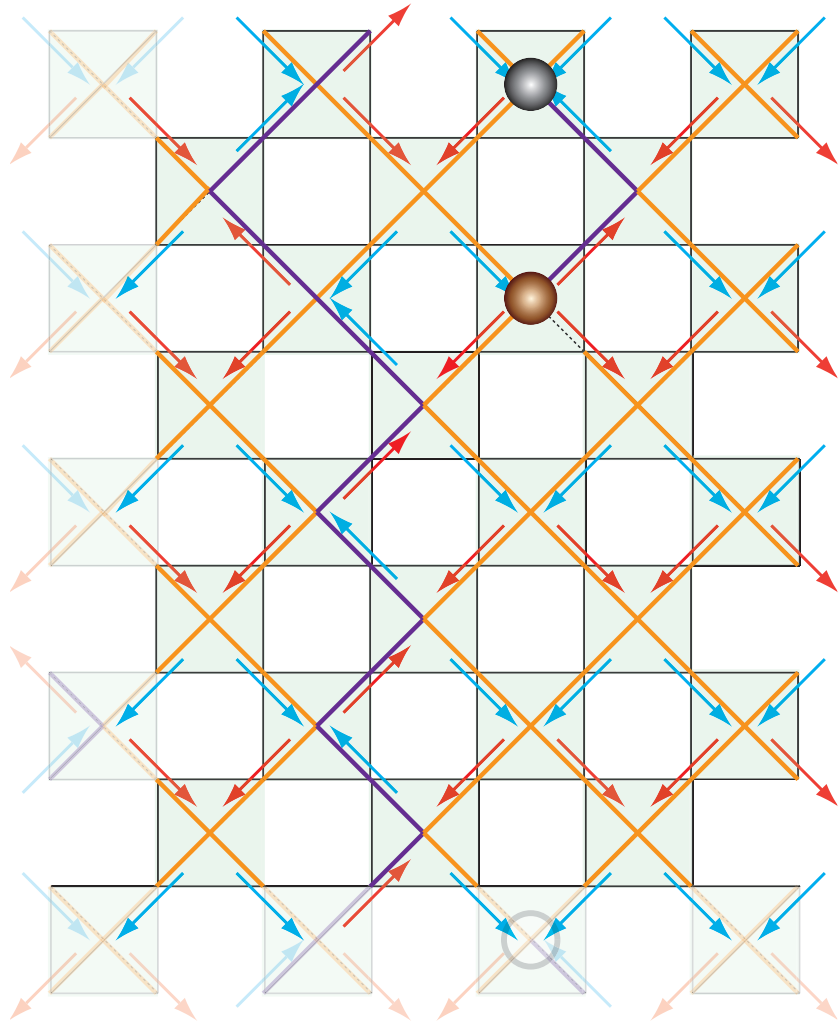
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{purple}) - (\# \text{ of } \text{orange})$$

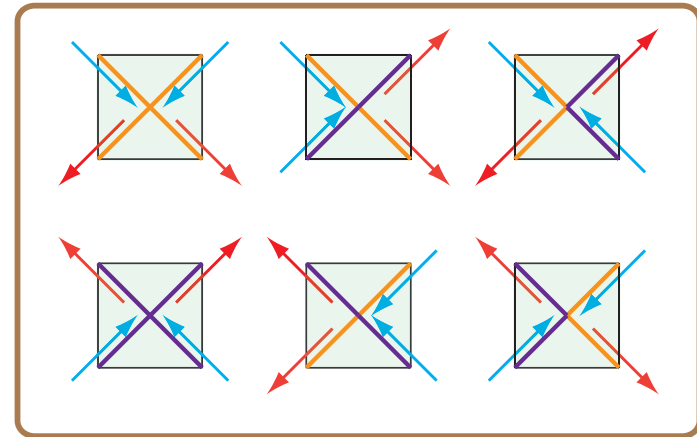
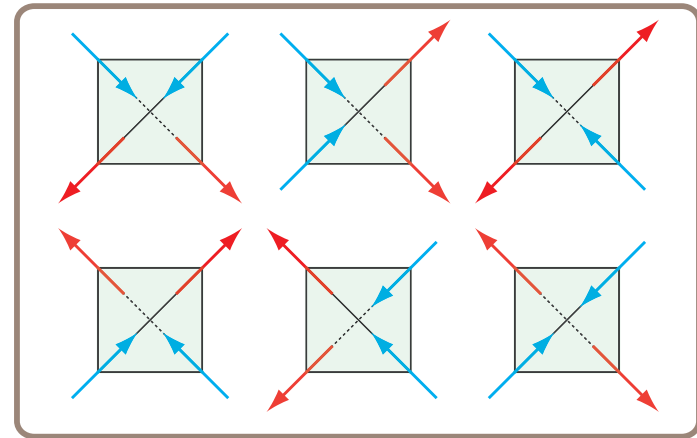
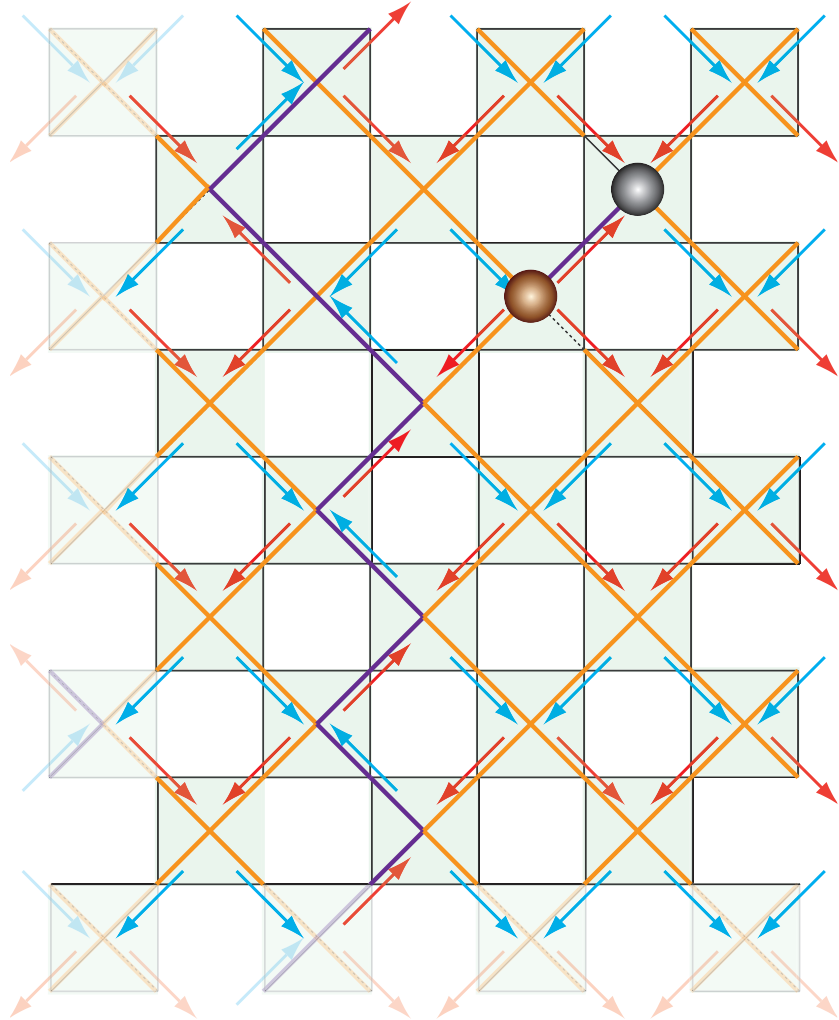
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

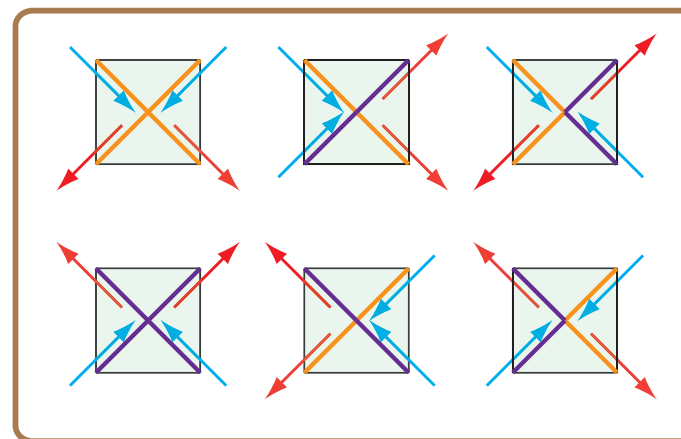
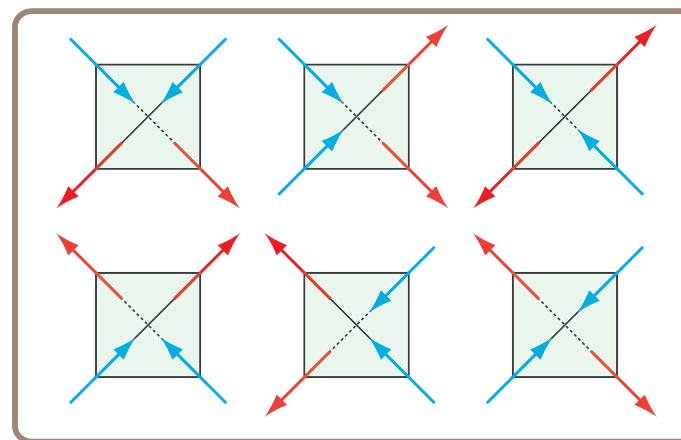
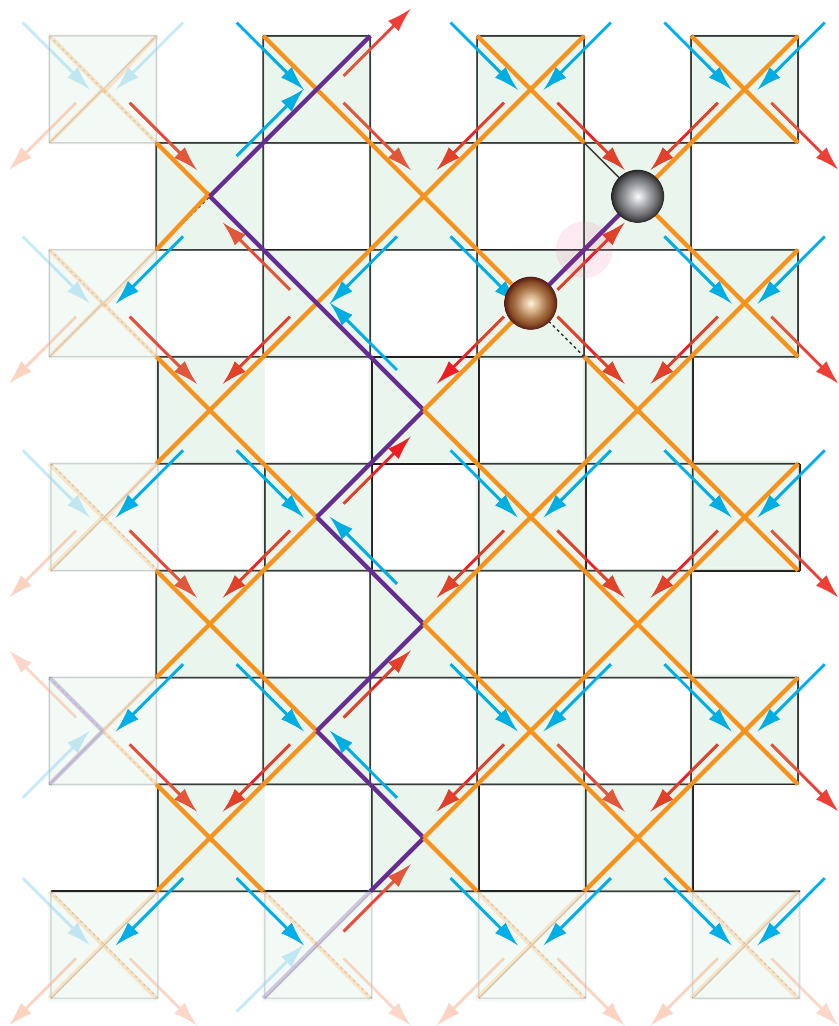
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

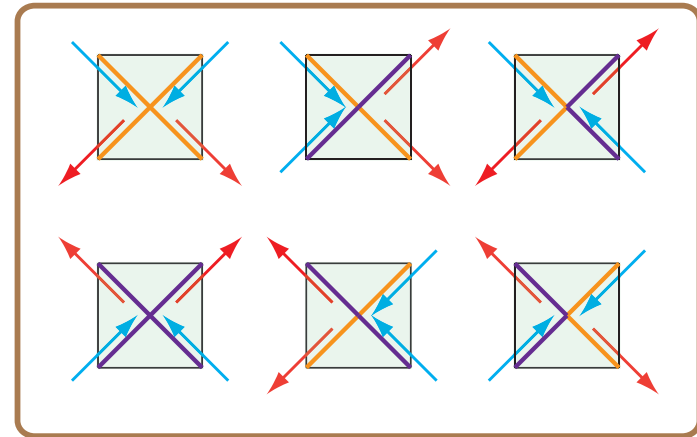
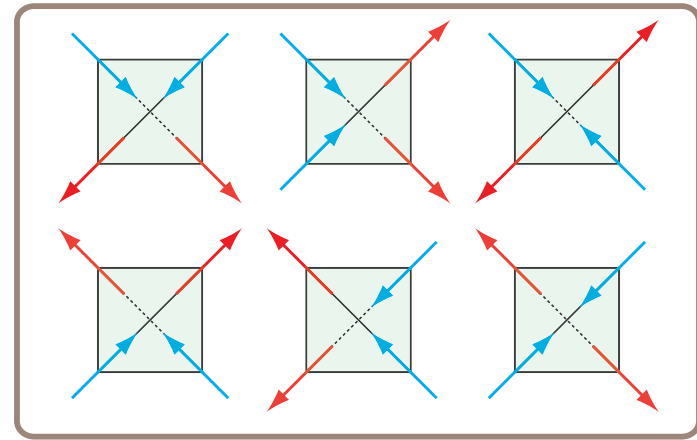
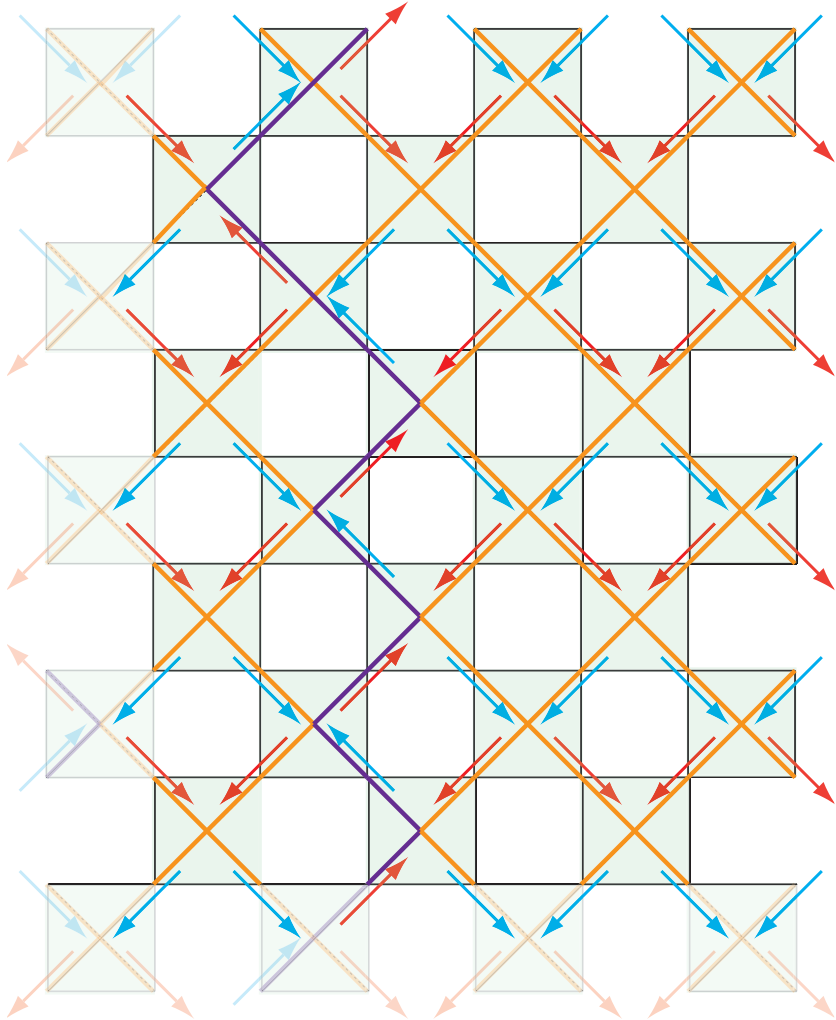
スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{purple}) - (\# \text{ of } \text{orange})$$

スピンのトポロジカル秩序と分数励起



Winding Number

$$w = (\# \text{ of } \text{---}) - (\# \text{ of } \text{---})$$

Short summary

幾何学的フラストレーション系の特徴

- 従래の見方: 大規模な基底状態の縮退を伴う乱雑な状態
- やや新しい発見: 隠れたトポロジカルな秩序

トポロジカル秩序に伴う励起状態

分数励起: 「スピン量子数の変化」が分裂する

電荷保存則: 異なる符号の電荷対が対生成/対消滅

トポロジカルセクターの揺らぎ

このようなトポロジカル秩序、励起状態の性質を積極的に反映した物理現象は色々あるはず。

伝導スピナイス系の分数励起ダイナミクス

Collaborators



Dr. Ludovic D. C. Jaubert (OIST)



Dr. Claudio Castelnovo (Cambridge)



Prof. Roderich Moessner (MPI PKS Dresden)

Pr₂Ir₂O₇: 格子構造

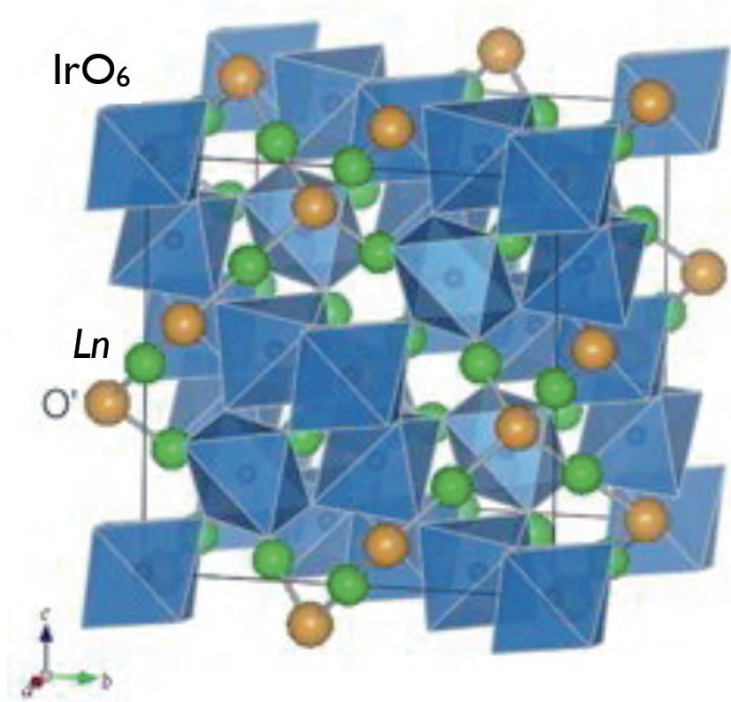


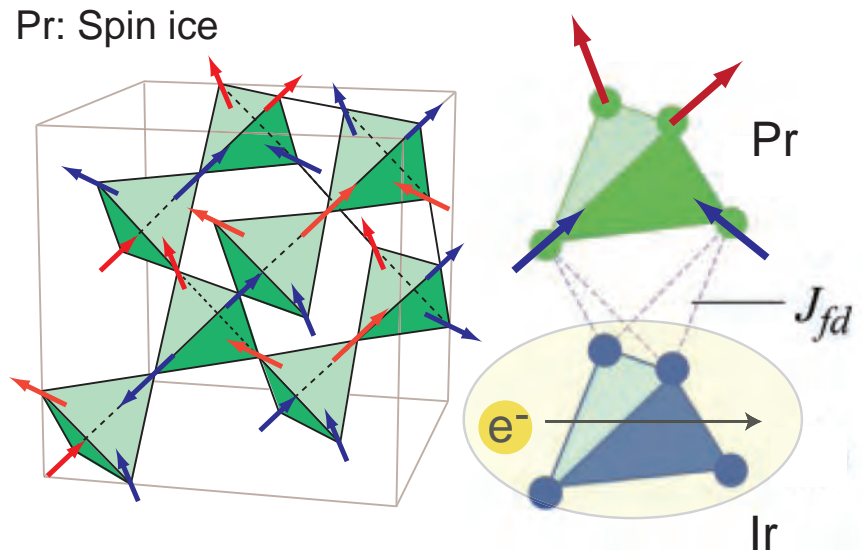
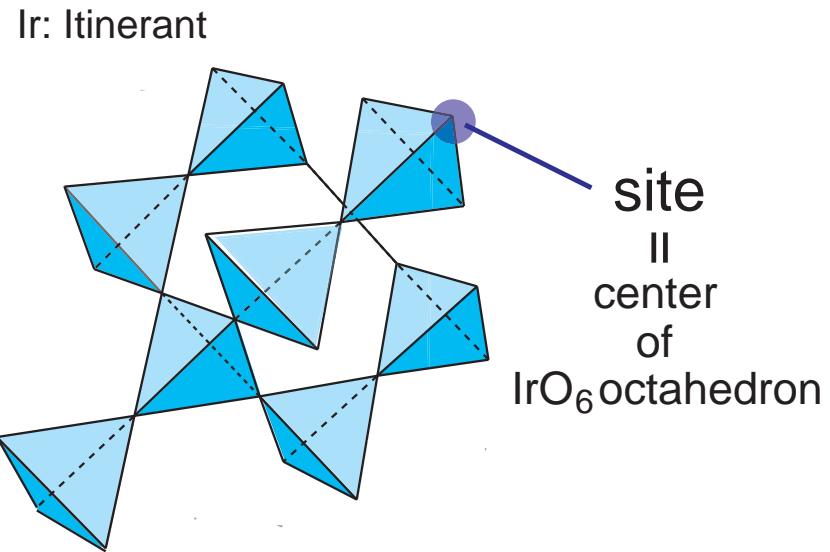
Fig.: Matsuhira (2008)

二重パイロクロア構造

A sub.: Pr 局在磁気モーメント

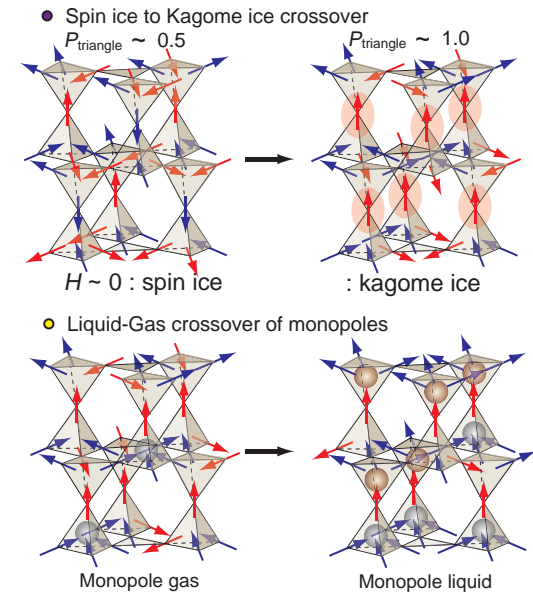
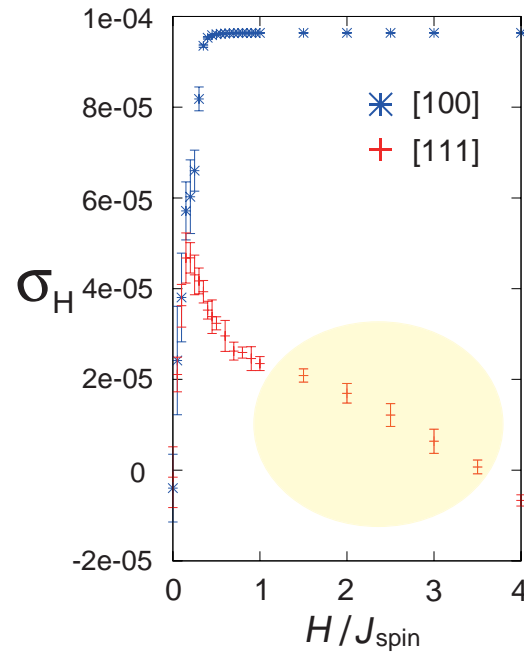
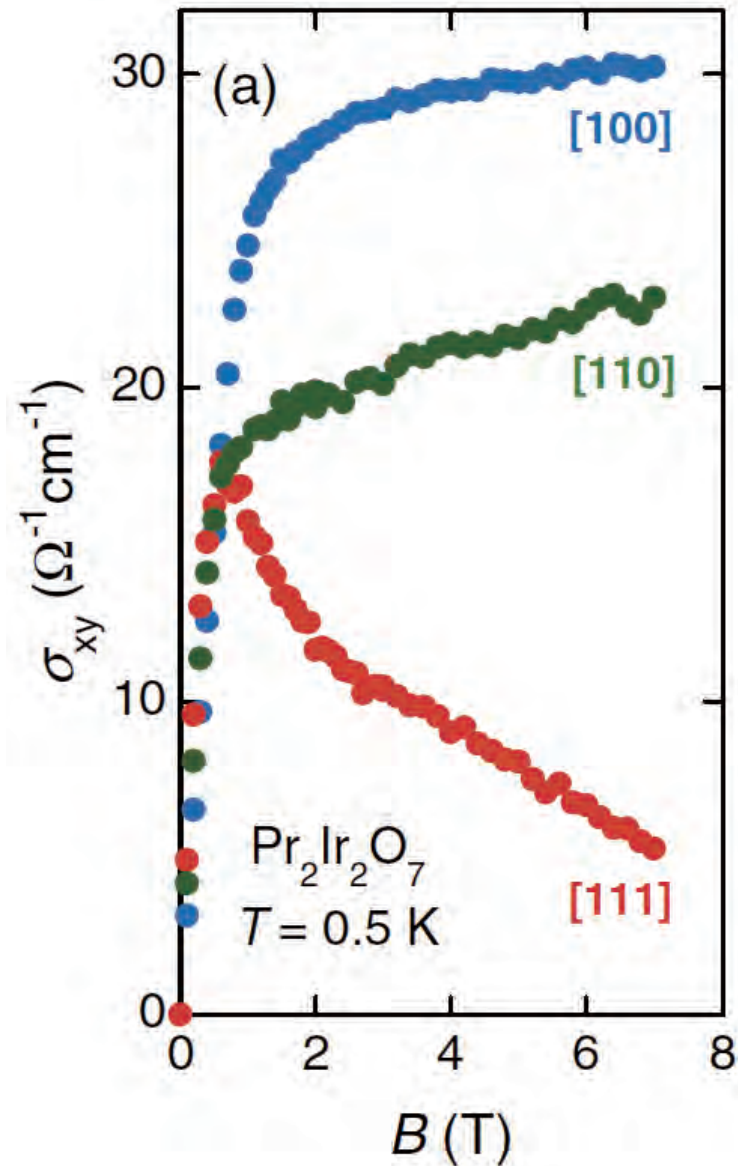
⇒ spin ice

B sub.: Ir 伝導電子系



Pr₂Ir₂O₇: Hall伝導度

Anisotropy in σ_{xy} (Machida 2007)



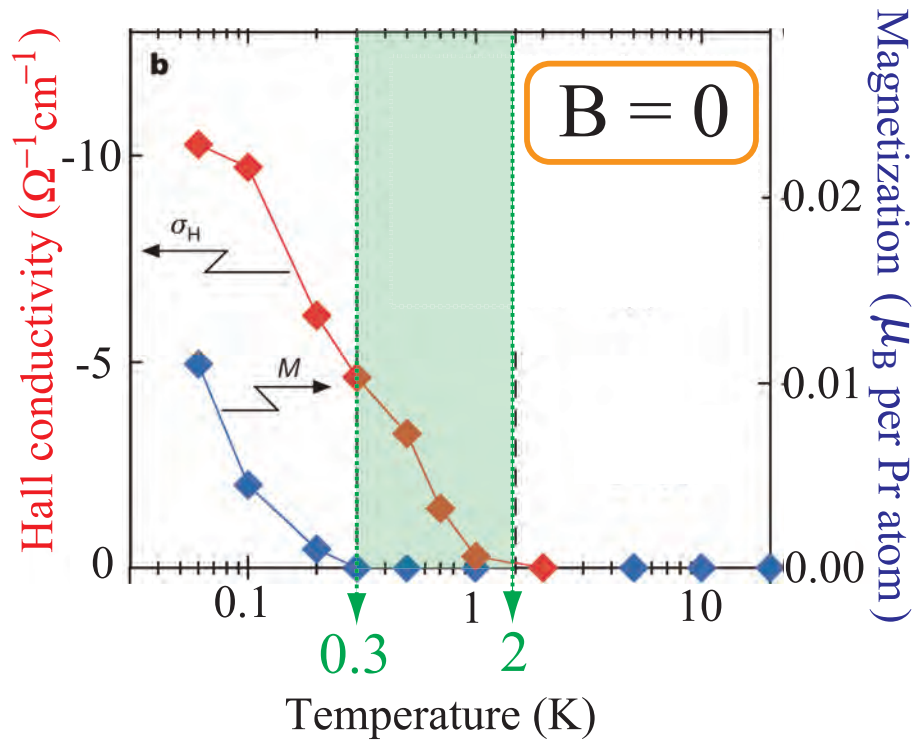
M. U. and R. Moessner (2013).

– Hall伝導度: σ_{xy}

$$J_y = \sigma_{xy} E_x$$

– モノポール密度の気液クロスオーバー

Pr₂Ir₂O₇: 自発ホール効果



Machida (2010)

自発ホール効果:

- 無磁場下で有限のホール伝導度

0.3K < T < 2K

磁場 B || [111]: 7 Tesla ⇒ 0:

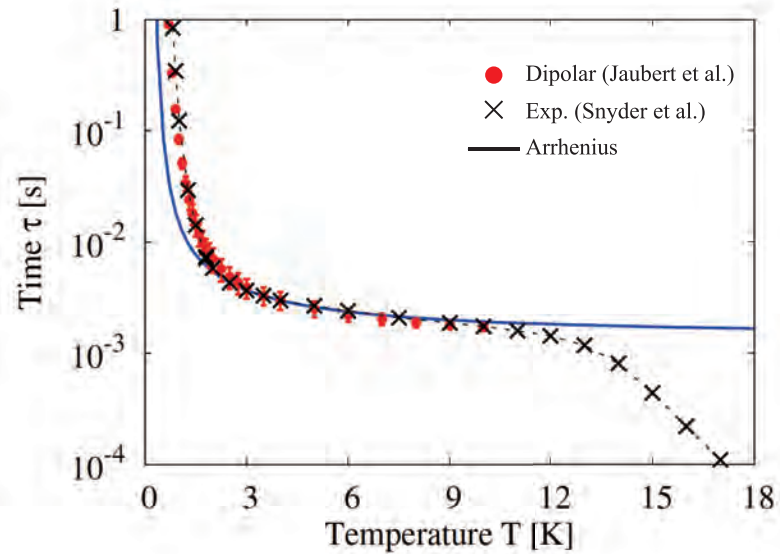
- 磁化の消失 (M = 0)

- 磁気秩序を伴わない時間反転対称性の破れ

- 何が対称性の破れを担うか?

双極子スピンアイスの動的特性

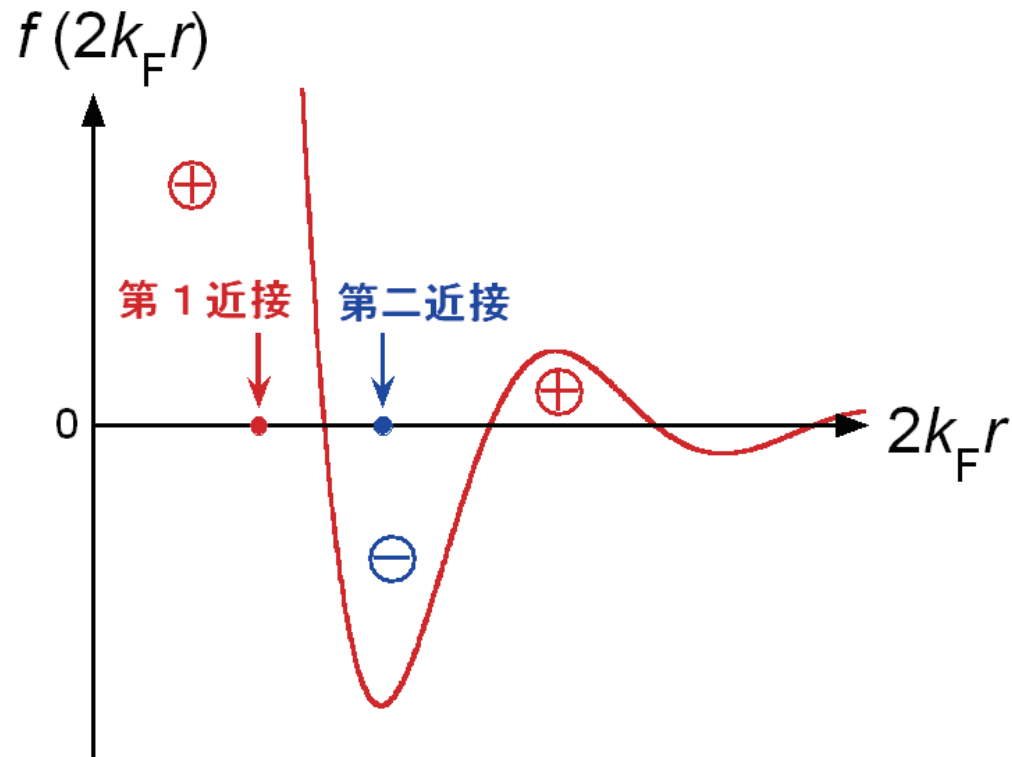
緩和時間 (ac 帯磁率) の温度依存性:



Matsuhira (2004), Snyder (2004), Jaubert (2010)

- 低温での緩和時間の発散
- 遅い緩和を担う励起状態？

伝導系のスピン間有効相互作用: RKKY相互作用



$$f(2k_F r) = \frac{-2k_F r \cos(2k_F r) + \sin(2k_F r)}{(2k_F r)^3}$$

- スピン間相互作用は (振動的) 長距離力
- 明らかに2-in 2-outを安定化しない

伝導電子系でスピンのような大きい縮退はあり得るのか？

スピンの安定性

そもそもスピンの縮退は何故保たれるのか？

– $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の場合: 双極子相互作用の長距離成分

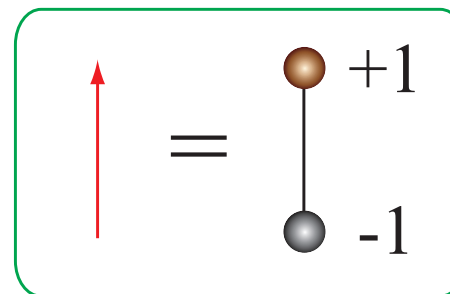
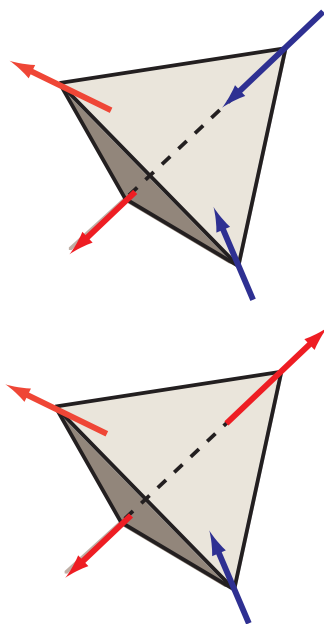
$$\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i < j} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]$$

スピンの安定性

そもそもスピンの縮退は何故保たれるのか？

- $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の場合: 双極子相互作用の長距離成分

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i < j} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]$$

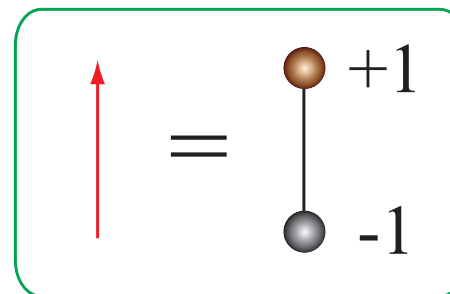
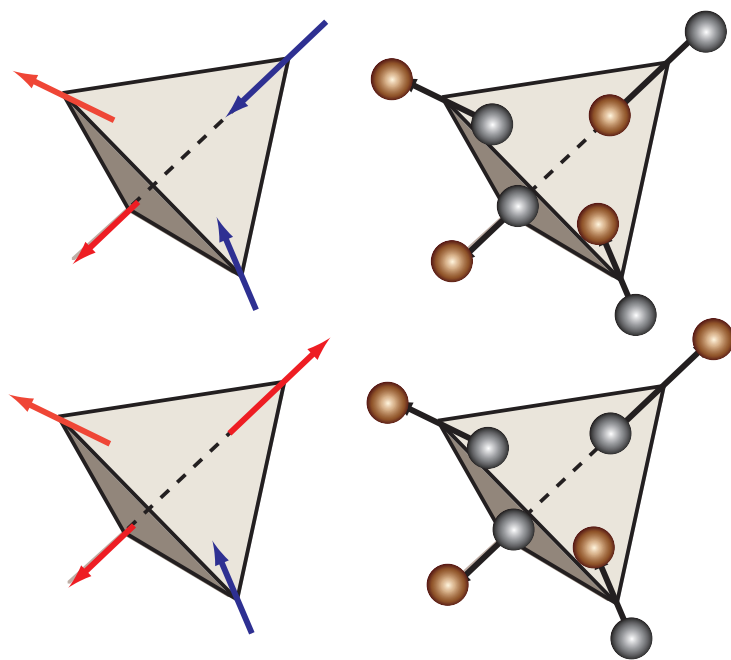


スピンの安定性

そもそもスピンの縮退は何故保たれるのか？

- $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の場合: 双極子相互作用の長距離成分

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i < j} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]$$

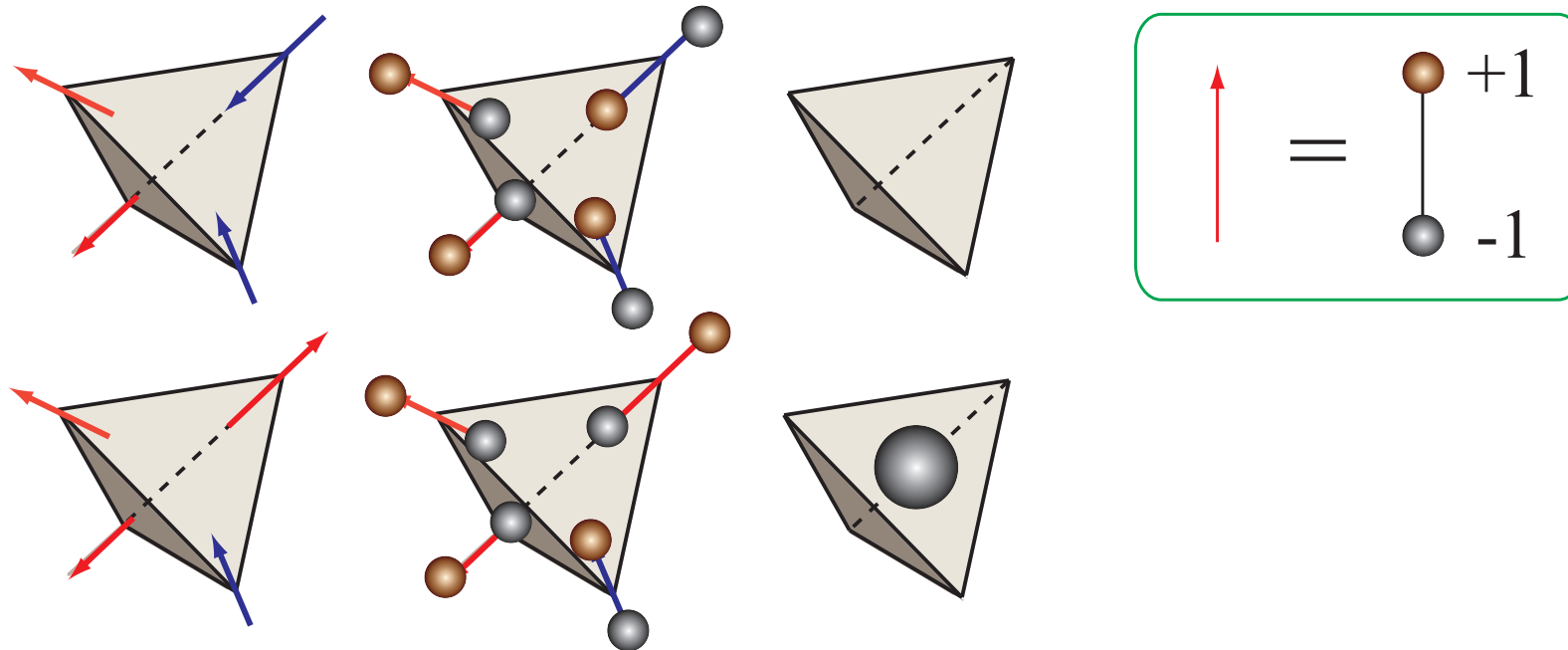


スピンの安定性

そもそもスピンの縮退は何故保たれるのか？

- $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の場合: 双極子相互作用の長距離成分

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i < j} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]$$

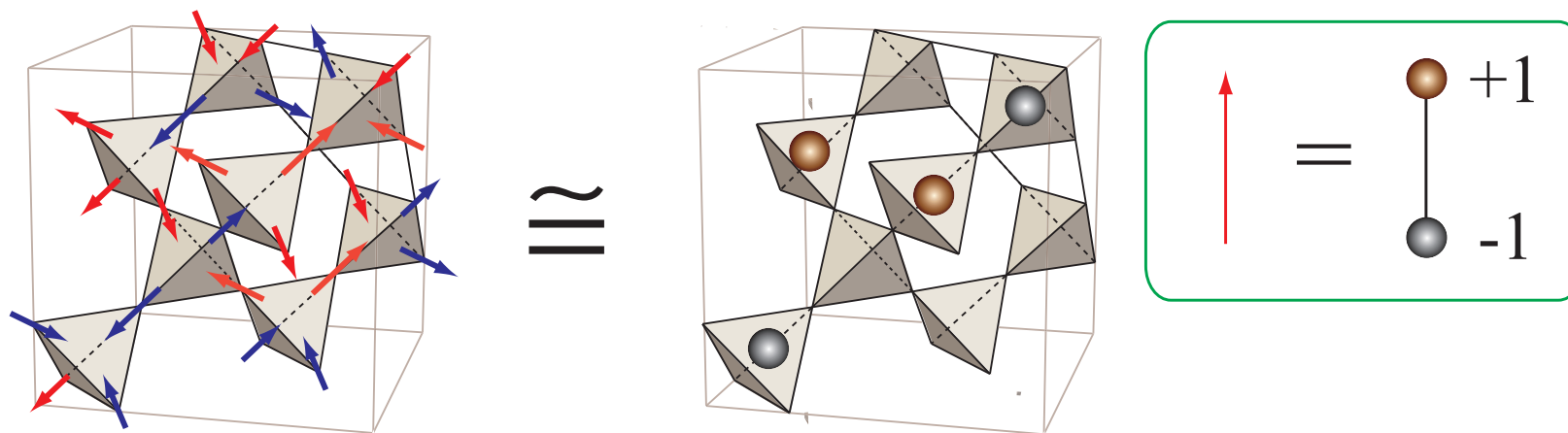


スピンの安定性

そもそもスピンの縮退は何故保たれるのか？

- $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の場合: 双極子相互作用の長距離成分

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i < j} \left[\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \rightarrow - \sum_{i < j} \frac{Q_i Q_j}{r_{ij}}$$

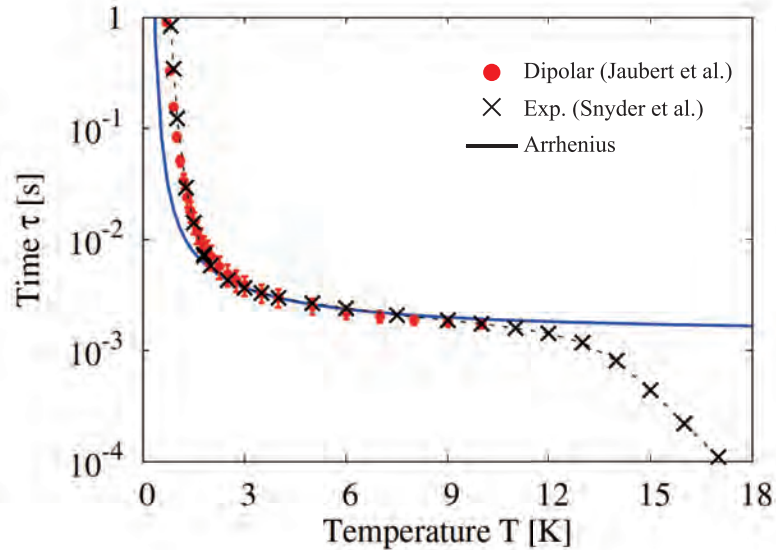


$\uparrow \downarrow$: dipolar interaction

$\bullet \ominus$: Coulomb interaction

双極子スピンの動的特性: non-contractible pair

緩和時間 (ac 帯磁率) の温度依存性:

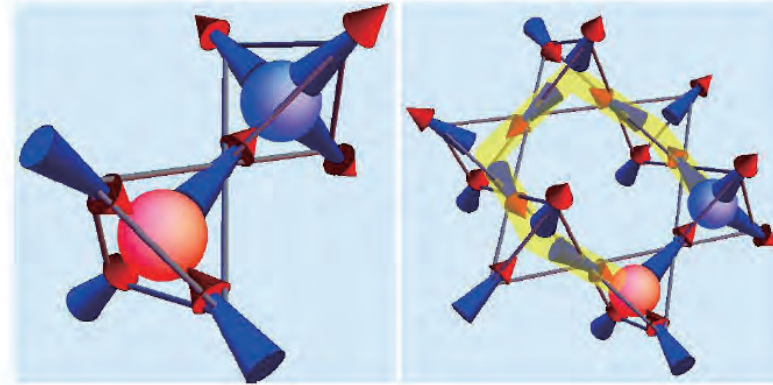


Matsuhira (2004), Snyder (2004), Jaubert (2010)

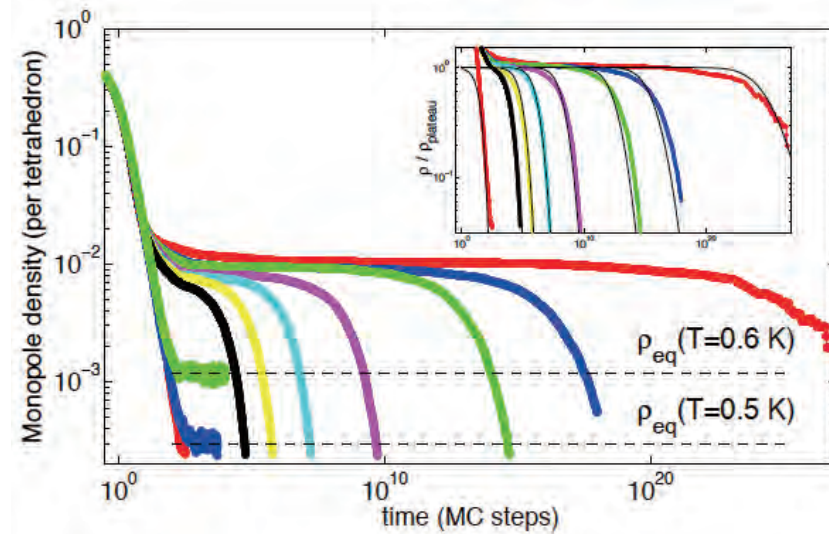
- 低温での緩和時間の発散
- モノポール対の束縛状態

双極子相互作用 → モノポール間引力

$$\mathcal{H} = \mu \sum_i Q_i^2 - \sum_{i < j} \frac{Q_i Q_j}{r_{ij}}$$



モノポール密度の時間依存性



Castelnovo (2010)

J_1 - J_2 - J_3 spin ice model

RKKY 相互作用:

- 長距離力 but fast-decaying: $\propto r^{-3}$
- sign-alternating

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \tilde{J}_1 \sum_{n.n.} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \tilde{J}_2 \sum_{2nd.} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \tilde{J}_3 \sum_{3rd.} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= J_1 \sum_{n.n.} \eta_i \eta_j + J_2 \sum_{2nd.} \eta_i \eta_j + J_3 \sum_{3rd.} \eta_i \eta_j\end{aligned}$$

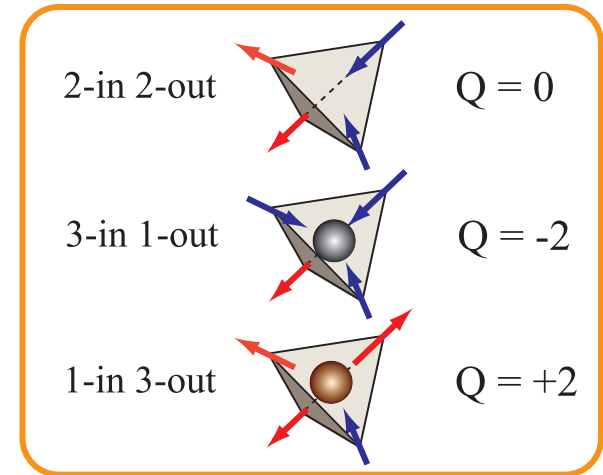
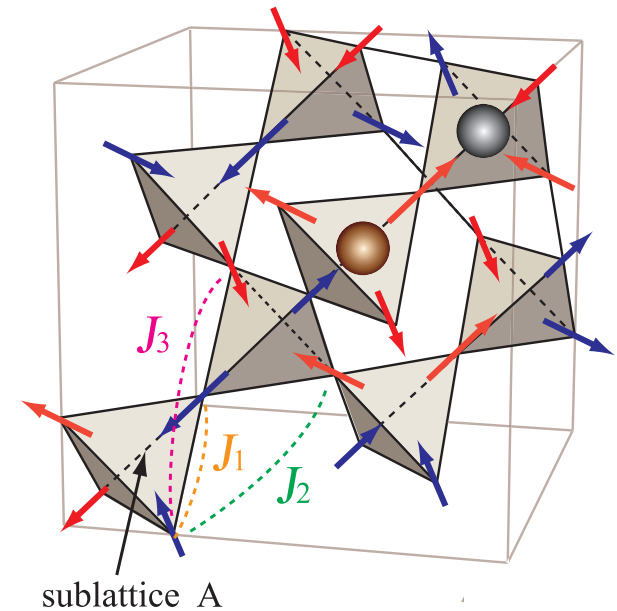
$\eta_i = +1(-1)$, for \mathbf{S}_i out (in) for sublattice A

Tetrahedral Charge: Q_p

$$\mathcal{H} = \left(\frac{1}{2} - J\right) \sum_p Q_p^2 - J \sum_{\langle p,q \rangle} Q_p Q_q$$

for $J_2 = J_3 = J$

H. Ishizuka & Y. Motome (2013)



古典確率過程によるダイナミクス

– N 個のイジングスピン $\rightarrow M = 2^N$ 状態: $\Omega_1, \dots, \Omega_M$

– 確率微分方程式

$$\frac{d}{dt}P(\Omega_j) = \frac{1}{\tau_0} \sum_{i \neq j} [P(\Omega_i)W(\Omega_i \rightarrow \Omega_j) - P(\Omega_j)W(\Omega_j \rightarrow \Omega_i)]$$

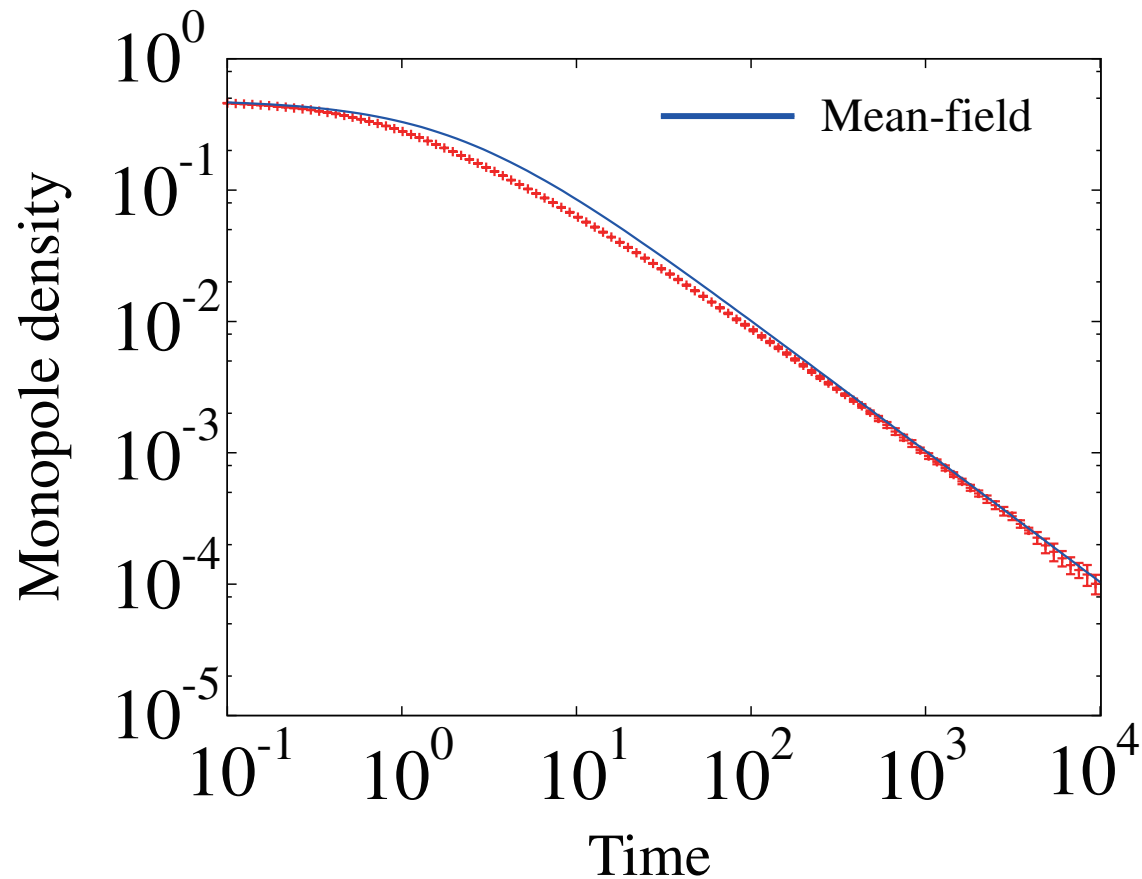
– $W(\Omega_i \rightarrow \Omega_j)$: 単一スピントリップのみを許す

– Thermal bath 型の確率過程

$$W(\Omega_i \rightarrow \Omega_j) = \frac{\exp(-\beta E(\Omega_j))}{\exp(-\beta E(\Omega_i)) + \exp(-\beta E(\Omega_j))}$$

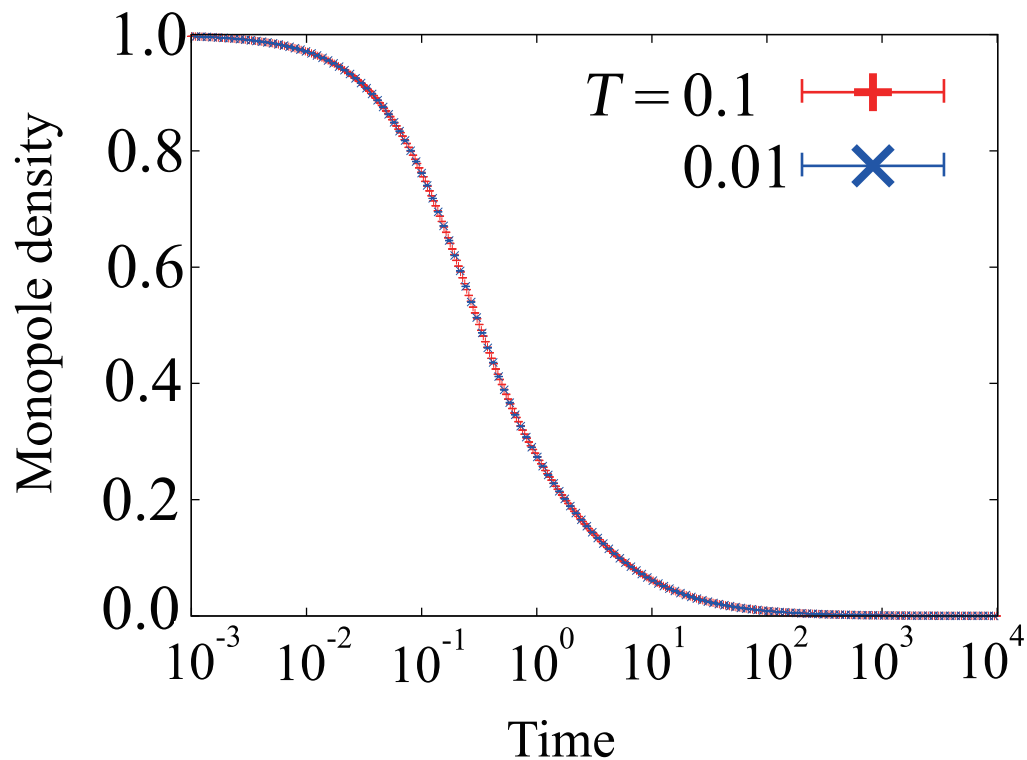
Results

Results: 最隣接スピナイス ($J_2 = J_3 = 0$): T quench: $T = 10 \rightarrow 0$

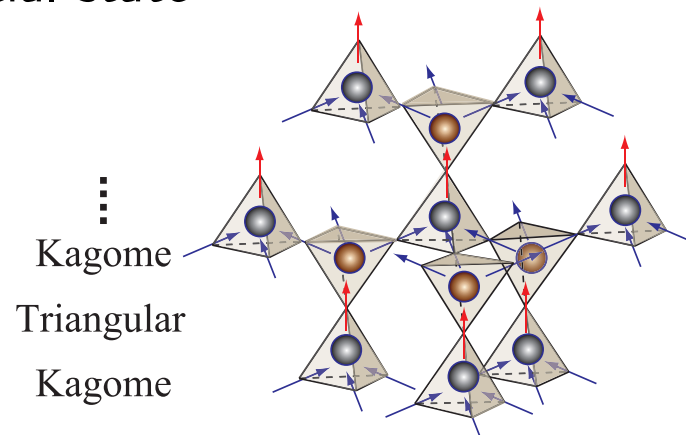


- モノポール密度: $\rho \sim \rho_0 / (1 + \frac{3\sqrt{3}}{4} g \rho_0 t)$, with $\rho_0 = 0.4869146729$ ($T = 10$)
c.f. mean-field model: $\frac{d}{dt} n_+ = \frac{d}{dt} n_- = -\lambda n_+ n_-$ Castelnovo (2010)

Results: 最隣接スピナイス ($J_2 = J_3 = 0$): H quench: $H = 100 \rightarrow 0 \parallel [111]$

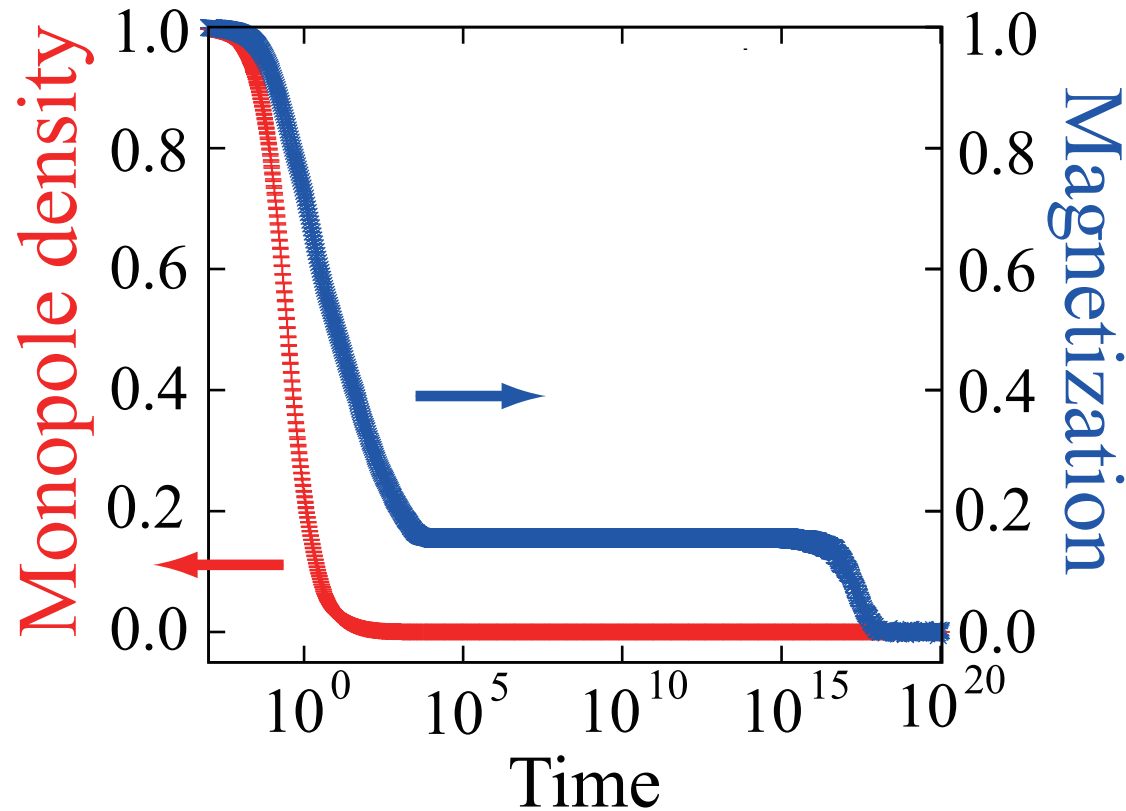


Initial state



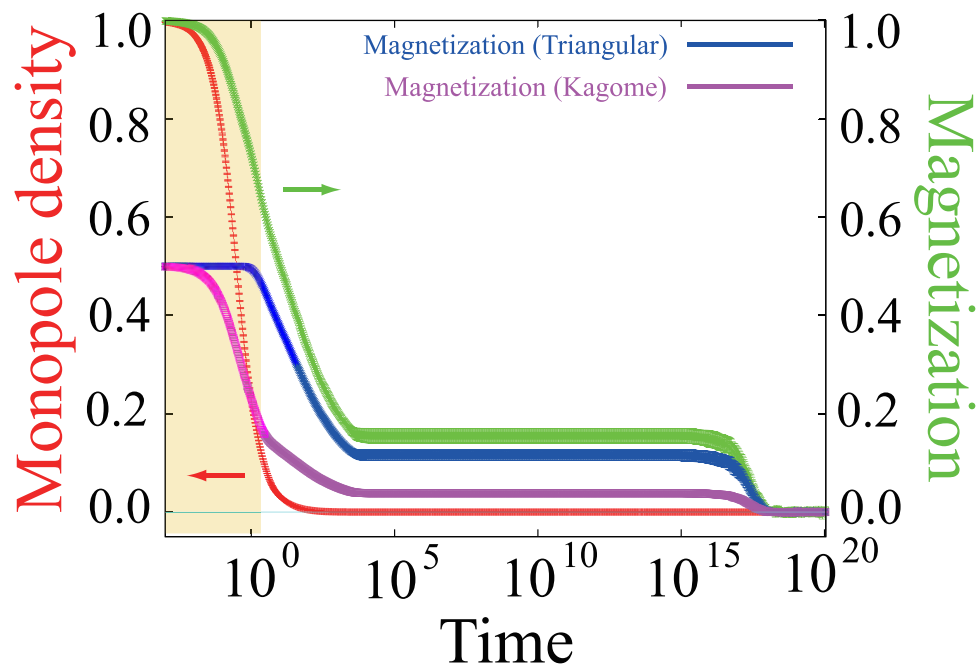
- 単調な緩和曲線
- 特徴的な時間スケールは存在しない

Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, ($J_2 = J_3 = -0.1, T = 0.10$): H quench



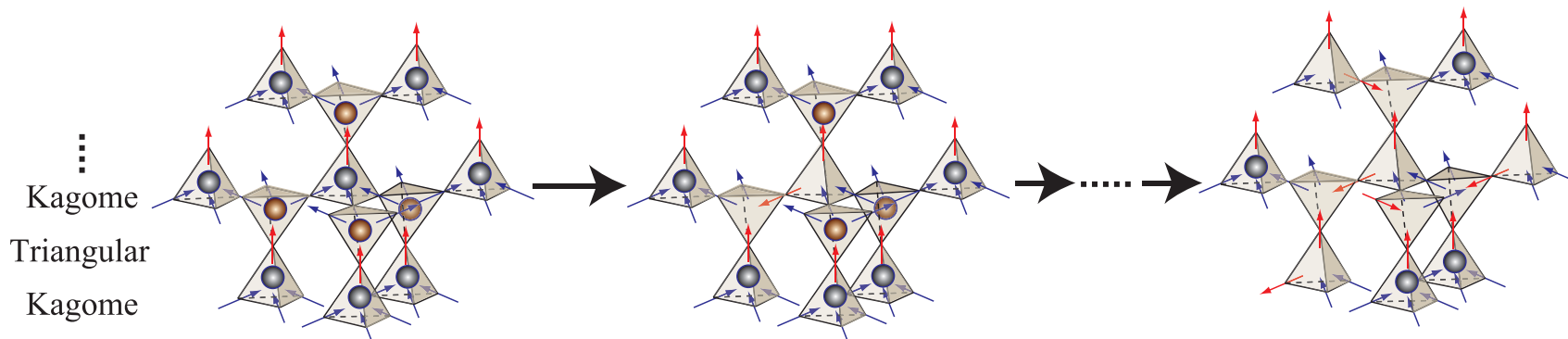
- モノポール励起間の短距離相互作用
- モノポール密度自身は速い緩和。広い磁化プラトー領域

Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, $J = -0.10, T = 0.10$

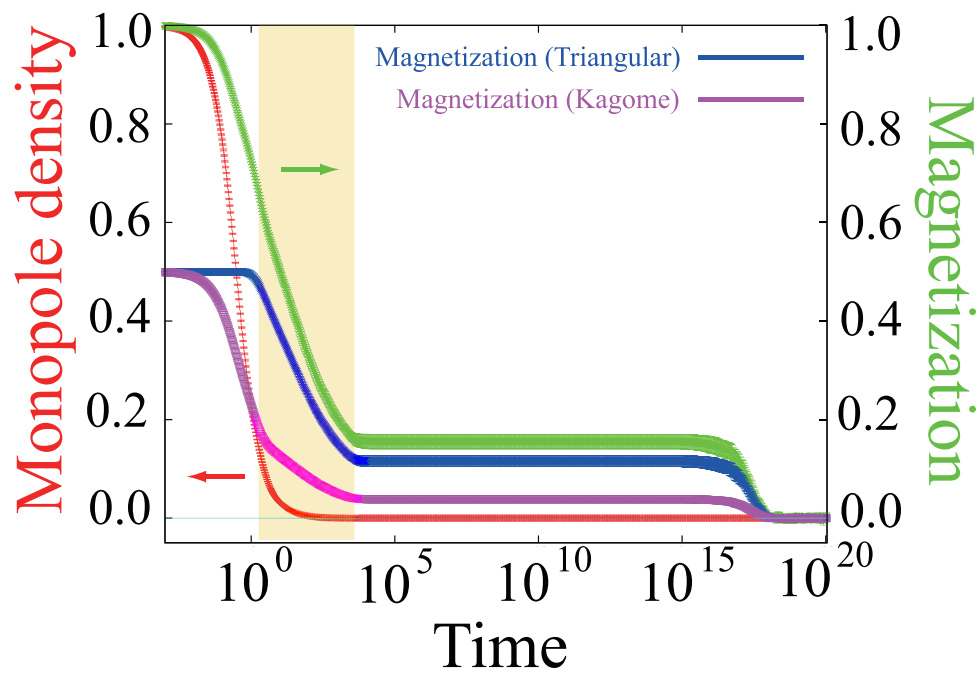


$$\mathcal{H} = \left(\frac{1}{2} + |J|\right) \sum_p Q_p^2 + |J| \sum_{\langle p,q \rangle} Q_p Q_q$$

カゴメ面での対消滅

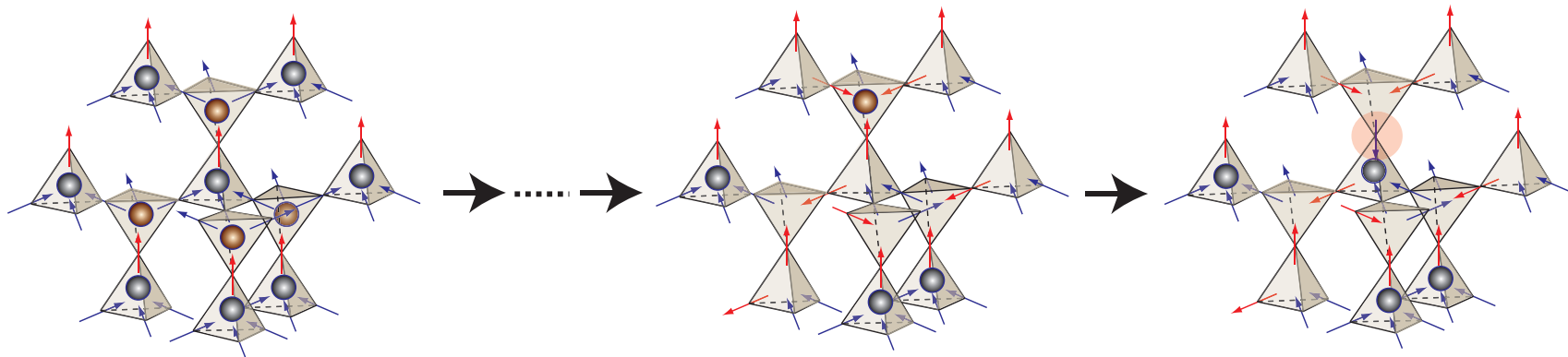


Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, $J = -0.10, T = 0.10$

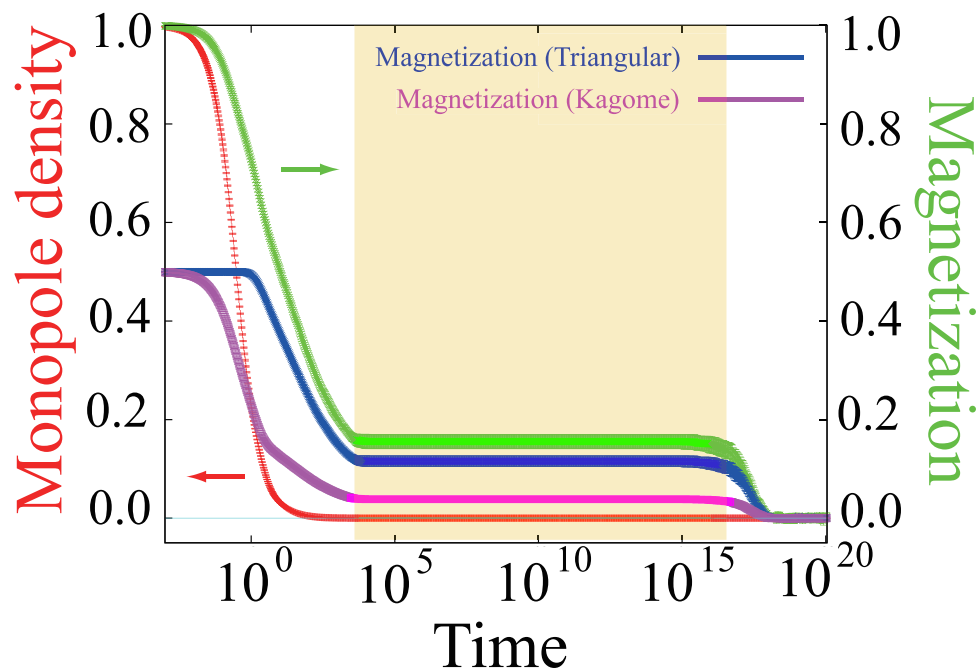


$$\mathcal{H} = \left(\frac{1}{2} + |J|\right) \sum_p Q_p^2 + |J| \sum_{\langle p,q \rangle} Q_p Q_q$$

カゴメ-三角面間のトンネル

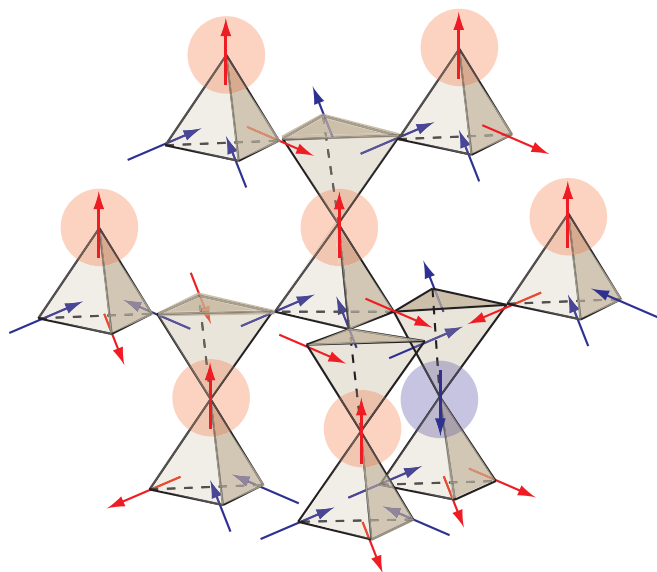


Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, $J = -0.10, T = 0.10$



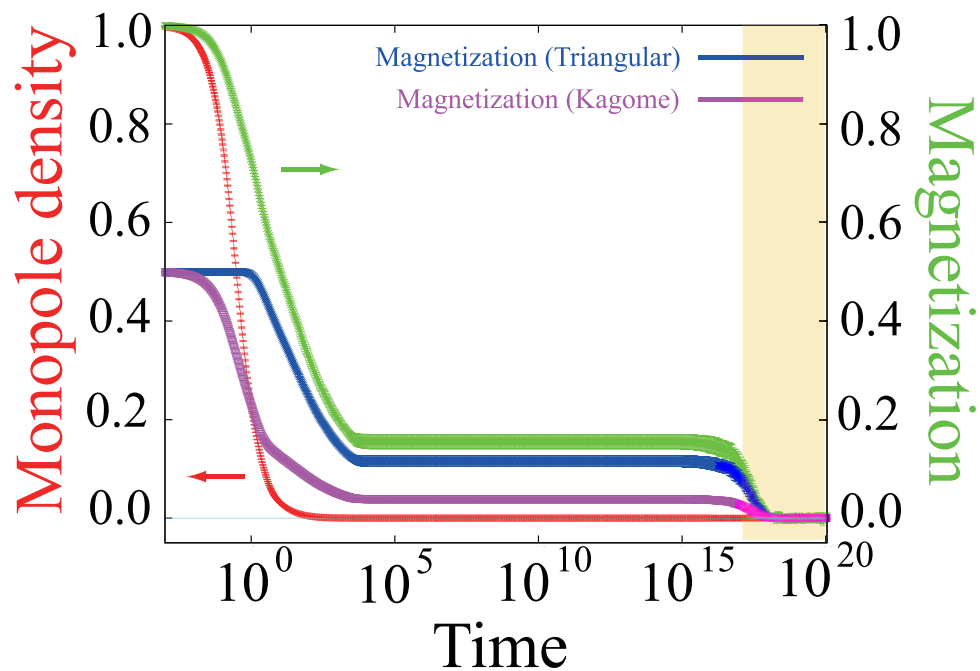
$$\mathcal{H} = \left(\frac{1}{2} + |J|\right) \sum_p Q_p^2 + |J| \sum_{\langle p,q \rangle} Q_p Q_q$$

- 磁化 “プラトー”
- モノポールの “Exhaustion problem”



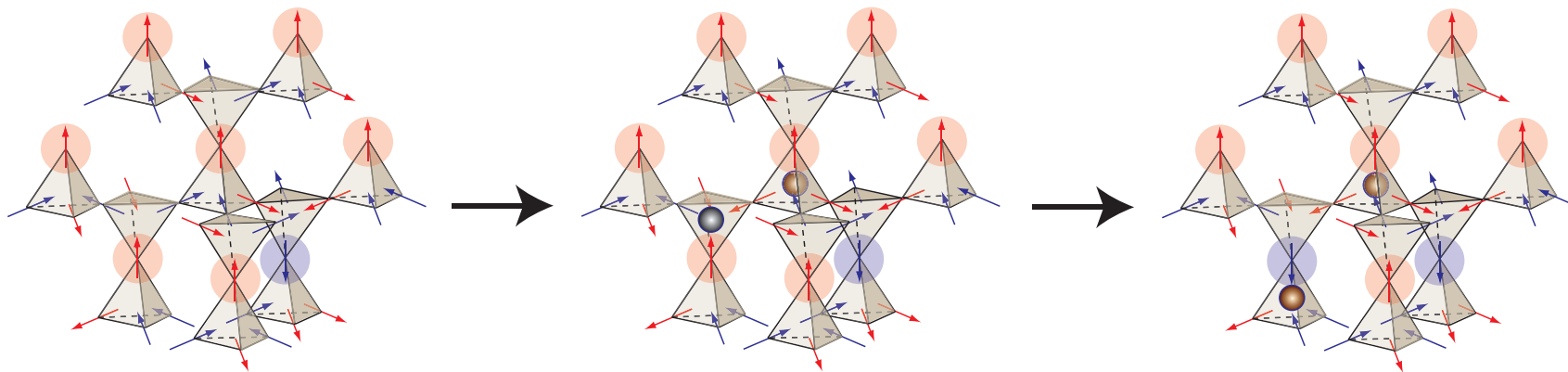
三角面のスピンを flip 仕切る前に
モノポールが完全に消滅する。

Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, $J = -0.10, T = 0.10$



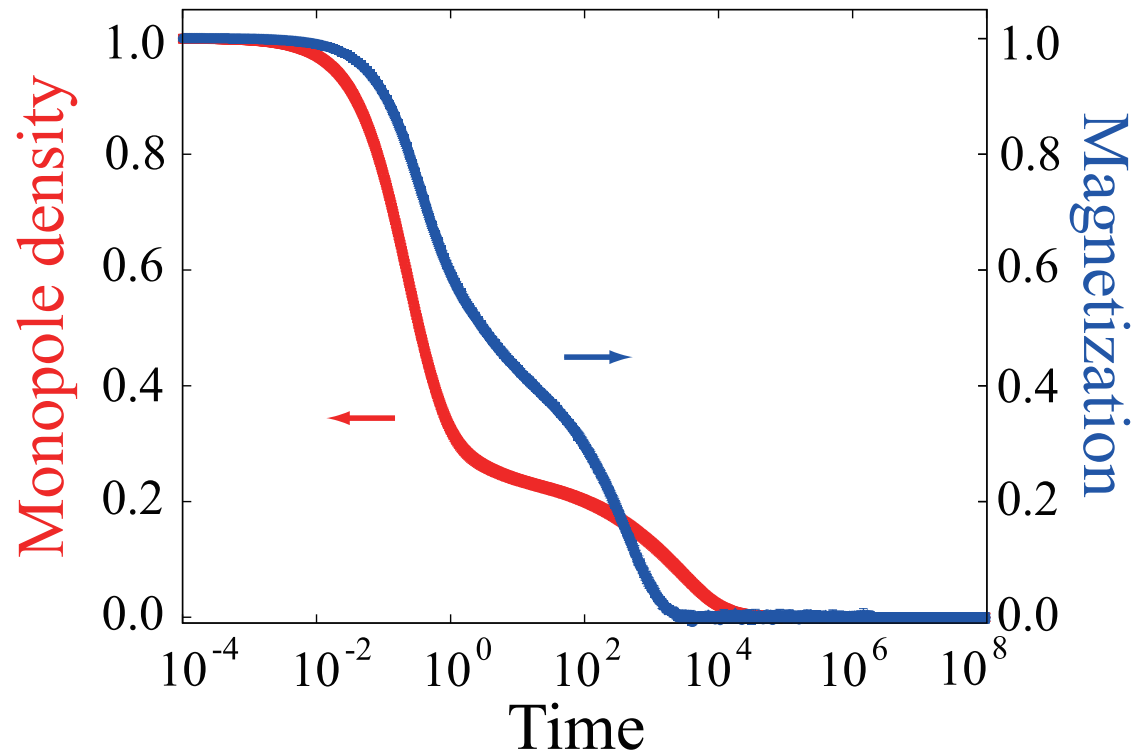
$$\mathcal{H} = \left(\frac{1}{2} + |J|\right) \sum_p Q_p^2 + |J| \sum_{\langle p,q \rangle} Q_p Q_q$$

- 磁化 $\rightarrow 0$
- モノポールの対生成
- $\rightarrow J < 0$ ではモノポールが磁化よりも早く消滅



Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, $J > 0$: H quench

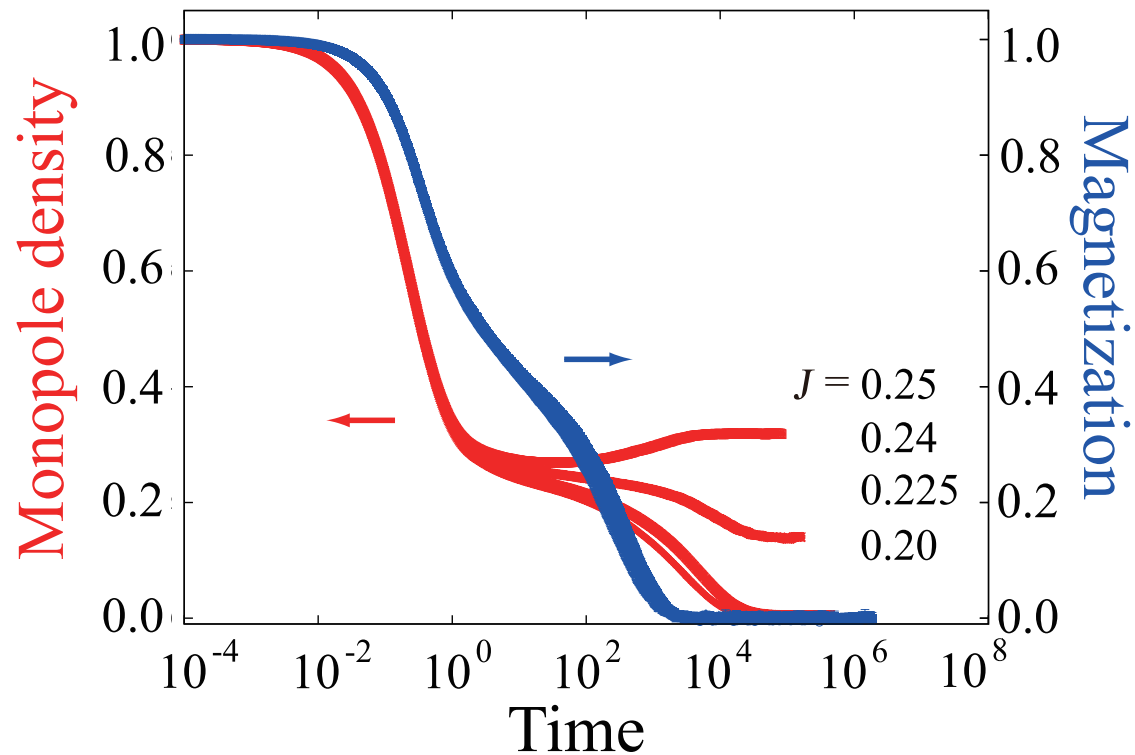
($J_2 = J_3 = J = 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$, $J/T = 0.125$)



- J/T の1パラメータスケーリング
- 磁化に比べてモノポール密度が遅い緩和を示す

Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, $J > 0$: H quench

($J_2 = J_3 = J \sim 0.25$, $J/T = 0.125$)



- 1パラメータスケールリングの破れ
- モノポール密度の増大

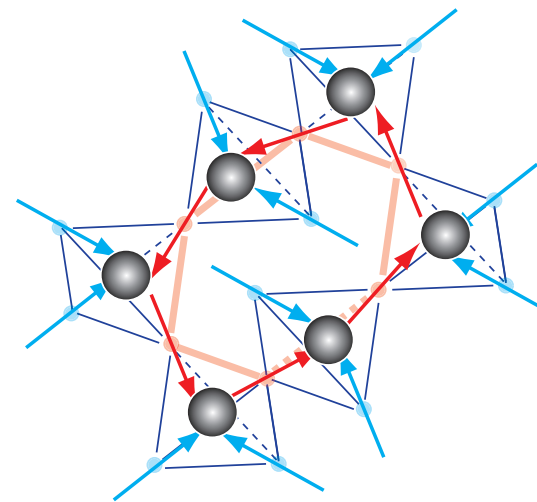
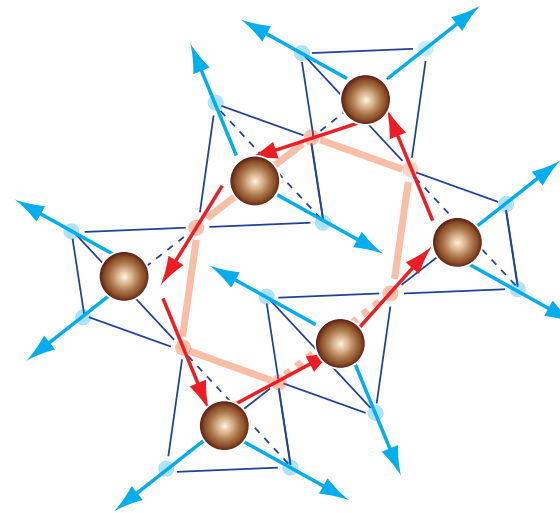
Results: $J_1 - J_2 - J_3$ model, $J_2 = J_3 = J > 0$: H quench

$$\mathcal{H} = \left(\frac{1}{2} - J\right) \sum_p Q_p^2 - J \sum_{\langle p,q \rangle} Q_p Q_q$$

$$\textcircled{J} = 1/4$$

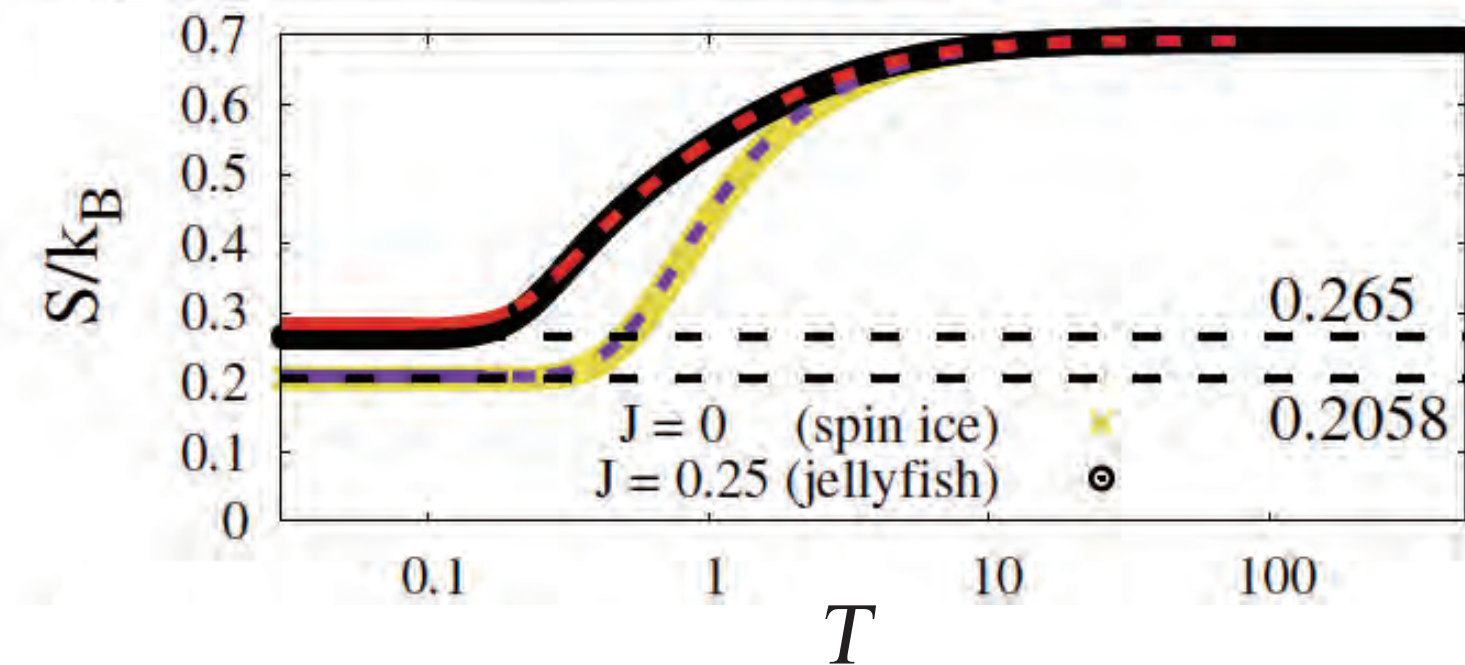
$$\mathcal{H} = \frac{1}{4} \sum_p Q_p^2 - \frac{1}{4} \sum_{\langle p,q \rangle} Q_p Q_q$$

- 同符号電荷間の引力
- モノポールの**励起エネルギー** = 引力
- モノポールリング: 運動学的安定性
- カイラル自由度
→ 時間反転対称性の破れを記憶



Results: Experimental Implication

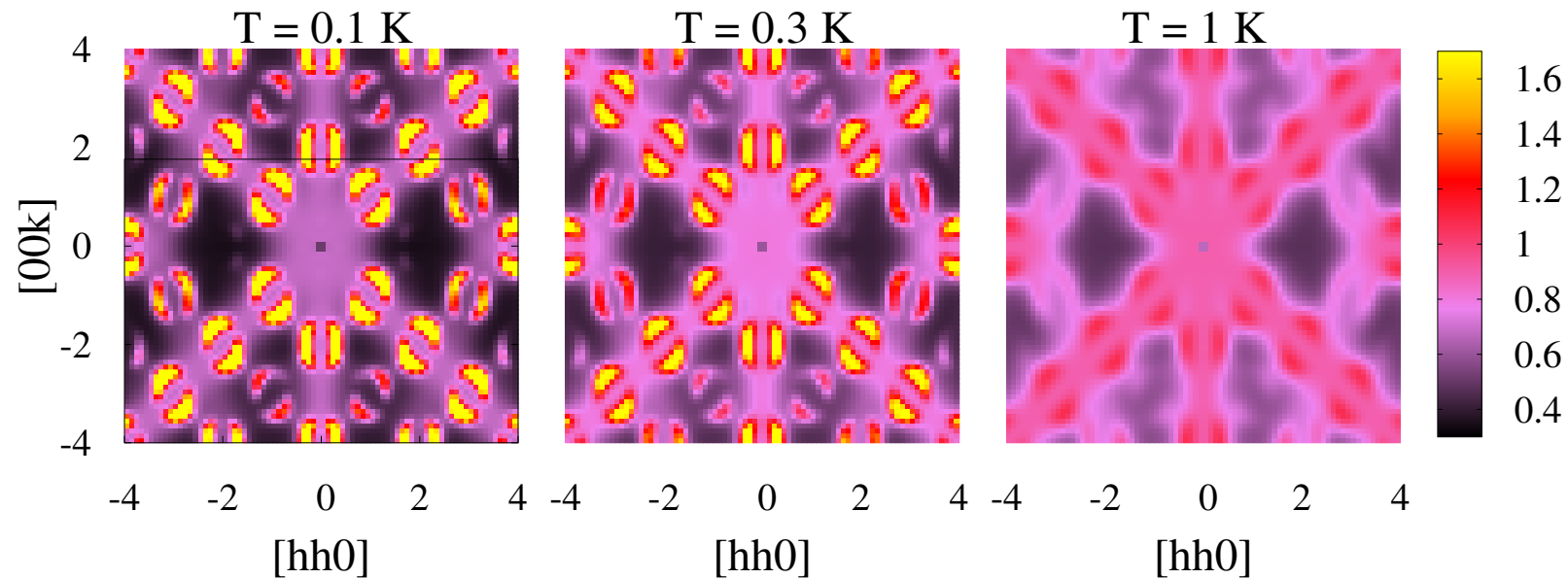
– 残留エントロピーの増大



– モノポールリングのソフト化により基底状態の縮退度が増加

– How to estimate ?

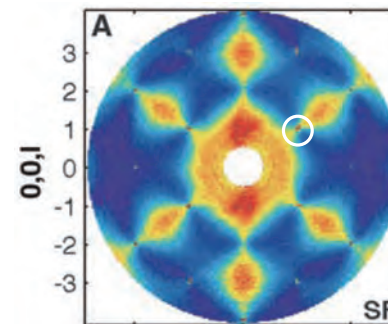
Results: Experimental Implication – 磁気構造因子の「半月」型構造



$$\langle B_\mu(0)B_\nu(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{4\pi K} \frac{3x_\mu x_\nu - |\mathbf{r}|^2 \delta_{\mu\nu}}{|\mathbf{r}|^5}$$

$$\rightarrow S_{\mu\nu}(\mathbf{q}) \propto \frac{1}{K} \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{|\mathbf{q}|^2} \right)$$

pinch point



Summary:

幾何学的フラストレーション系の特徴

- 基底状態の大規模縮退と残留エントロピー
- トポロジカル秩序と分数励起

伝導スピナイス系への応用

- $J_1 - J_2 - J_3$ スピナイスモデルにおけるダイナミクスの解析
- カイラル自由度を持つモノポールリングの形成
 - モノポールリングの選択的緩和による自発ホール効果の可能性
- 残留エントロピーの増大、磁気構造因子における半月型構造