

目次

Abstract	i
第 1 章 序論	1
1.1 フラストレーション	1
1.2 スピン自由度のフラストレーション	1
1.3 軌道自由度のフラストレーション	4
1.4 軌道自由度のある系におけるクラスター形成	6
1.5 本研究の目的	7
1.6 本論文の構成	7
第 2 章 多量体化を起こす系の実験と従来の理論	9
2.1 三角格子系 LiVX_2 ($X=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$) における三量体化	9
2.1.1 実験結果	9
2.1.2 従来の理論	15
2.2 $\langle 111 \rangle$ パイロクロアスラブ系 $\text{SrM}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$ ($M=\text{V}, \text{Cr}$)	18
2.2.1 $\text{SrV}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$	18
2.2.2 $\text{SrCr}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$	23
2.3 パイロクロア格子を持つスピネル酸化物系	25
2.3.1 AlV_2O_4 における実験結果	26
2.3.2 LiV_2O_4	31
2.3.3 七量体形成に関する従来の理論	36
第 3 章 モデルと手法	41
3.1 背景	41
3.2 モデルハミルトニアン	41
3.2.1 ホッピング項 \mathcal{H}_{hop}	42
3.2.2 電子間クーロン相互作用項 \mathcal{H}_{int}	44
3.2.3 三方晶歪み項 \mathcal{H}_D	44
3.2.4 全ハミルトニアン	45
3.3 計算手法	45
3.3.1 ハートリーフック近似	45
3.3.2 格子歪みに対する断熱近似	46

3.3.3	自己無撞着解法	47
3.4	計算の詳細	47
第 4 章	結果と議論	49
4.1	三角格子系	49
4.1.1	相図	49
4.1.2	非磁性領域	53
4.1.3	磁性領域	58
4.2	$\langle 111 \rangle$ パイロクロアスラブ格子系	62
4.2.1	相図	62
4.2.2	三量体相	67
4.3	パイロクロア格子系	74
4.3.1	相図	74
4.3.2	七量体相	79
第 5 章	まとめ	84
第 6 章	謝辞	86