

二次元三角格子ハイゼンベルク反強磁性体の相転移

阪大・教養 川村 光  
東大・理 宮下 精二

二次元三角格子ハイゼンベルク反強磁性体はフラストレートした連続スピン系であり近年理論・実験<sup>1)</sup>両面から注目されている。我々はハミルトニアン

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (J > 0, |\mathbf{S}_i| = 1)$$

で最近接相互作用する古典ハイゼンベルク模型を系の defect のトポロジック的解析とモンテカルロシミュレーションにより調べた<sup>2)</sup>。三角格子は三つの sublattice から成るが基底状態では異なる sublattice 上のスピンの互いに  $120^\circ$  の角度をなす所謂  $120^\circ$  構造をとる。この場合のオーダーパラメーターは回転群  $SO(3)$  (あるいは射影空間  $P_3$ ) であり通常のハイゼンベルク強磁性体や bipartite な格子上的反強磁性体のオーダーパラメーターが球面  $S_2$  であるのと異なり、異なる。(図1参照) この時系がどのようなトポロジック的に安定な(即ちスピン波によって消せない)欠陥を持つかはオーダーパラメーター空間のホモトピー群によって調べられる<sup>3)</sup>。回転群はホモトピー群:

$$\pi_0(SO(3)) = 0, \quad \pi_1(SO(3)) = \mathbb{Z}_2, \quad \pi_2(SO(3)) = 0,$$

と特徴付けられ、これは系がトポロジック的に安定な点欠陥 (= vortex) を持つ事を意味している。ただしこの vortex は量子数として“有る無し”に対応した“偶奇性”のみを持つ ( $\mathbb{Z}_2$  vortex)。実際の vortex の一例を図2に示す。図 a, b はそれぞれ  $120^\circ$  構造が順方向・逆方向に回転している vortex の例である。通常の強磁性的 planar モデルの vortex の場合には、このような二種の vortex は連続変換によって互いに移り変わる事は出来ないが、今の場合スピン空間の三次元性を利用して  $120^\circ$  構造が乗っている面を系全体で反転させる事によって互いに移り変わる事が出来る。他方どちらの場合についても vortex が無い状態(図c)に連続変換によって移る事は不可能であり、これは vortex がトポロジカルに安定な励起である事に対応している。

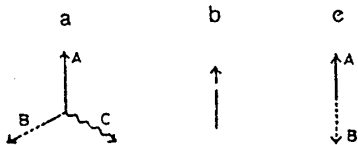


図1 ハイゼンベルク磁性体のオーダーパラメーター。a 三角格子反強磁性体, b 強磁性体, c bipartite な格子上的反強磁性体。

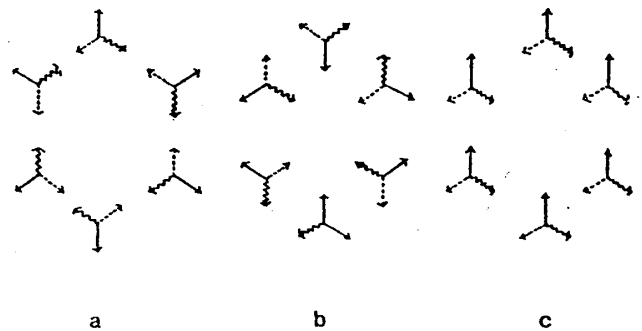


図2 vortex の例。a, b  $\mathbb{Z}_2$  vortex が有る状態。c vortex が無い状態。

vortexとしては図2にあげた以外にも様々なタイプが可能である。別の例を図3に示した。ここで以下で定義されるベクトル量 "chirality" を導入すると便利である。

$$\vec{\sigma} \equiv \frac{2}{\sqrt{3}} (\vec{s}_1 \times \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \times \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \times \vec{s}_1).$$

$\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3$  は三角格子上一つの三角形 (plaguet) の頂点上のスピンを表わす。この量は  $120^\circ$  構造の乗っている平面に垂直なベクトルであり また  $120^\circ$  構造が完全である程その絶対値は大きい。(  $\sigma$  は完全な  $120^\circ$  構造に対して1になる様 normalize されている。) 図2に示した vortex の場合  $\vec{\sigma}$  は常に紙面に垂直であり回転していないが 図3に示した例では  $\vec{\sigma}$  自体が回転している。実は single vortex のエネルギーを計算してみると図3に示した vortex の方が低いエネルギーを持つている事が判り 実際の平衡状態では図3のタイプの vortex が支配的と予想される。即ち我々の  $Z_2$  vortex は chirality vector のなす渦とみなす事も可能である。一般的に孤立した vortex はそのサイズの対数に比例したエネルギーを持つから 十分低温では対とな、2のみ存在し得る。(たとえば図3の vortex のエネルギーは  $E_v \approx \sqrt{3}\pi \ln \frac{R}{a}$  与えられる。ただし  $R$  は系の linear dimension,  $a$  は格子の cutoff)  $Z_2$  vortex は偶数個集まる事によってエネルギーを有限に出来る性質を持っている。さらに 温度を上げていけば Kosterlitz-Thouless のメカニズムにより渦の解離に対応した相転移を示すはずである。低温相は free vortex が存在しない事によって特徴づけられるが トポロジーの議論により 低温相は  $n=4$  の強磁性的ハイゼンベルグ模型と同じ対称性を持ち 特にスピン相関関数は  $T_c$  以下でも指数関数的に減衰すると予想される。

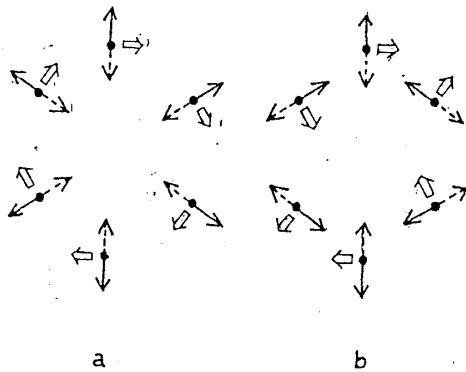


図3 vortexの例。↑は chirality vector を表わす。↑の sublattice のスピンは紙面に垂直に向いている事に注意。

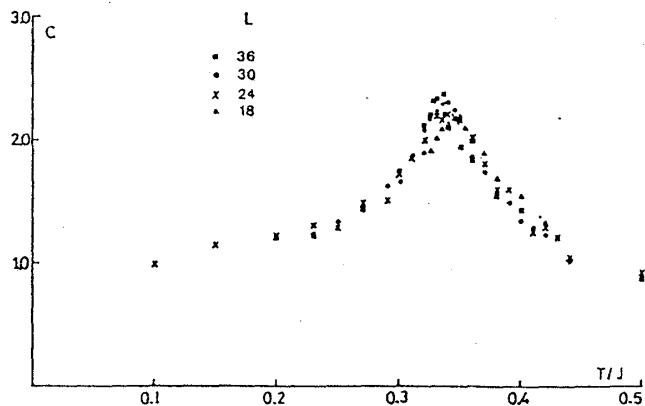


図4 比熱の温度依存性。

以上のシナリオが実際に成り立っているかどうかをモンテカルロシミュレーションにより調べた。系のサイズ ( $L \times L$ ) は  $L=12, 18, 24, 30, 36$ , 最初の 5000 MCS を捨て 40000 MCS について平均した。図4に比熱の温度依存性を示す。  $T/J \approx 0.33$  にシャープな

ピークが見られる。図5に chirality の大きさ  $\chi$  の温度依存性を示す。有限温度でもかなりの温度範囲に渡って  $120^\circ$  構造が近似的に成立している事が判る。図6に vortex の数密度  $n_v$  の温度依存性を示した。比熱のピークの前後で vortex の数密度が急激に変化しているのが見出される。図7には同じ量を対数スケールで温度の逆数に対してプロットした図を示す。低温側では直線性がよく activation energy が  $\chi \mu \approx 3.3$  J の vortex 対の励起によって説明できるが 高温側では直線からずれる。以上のデータは通常 強磁性的 planar モデルの対称する量の振舞いによく似ており<sup>5)</sup>  $T_c \approx 0.33$  J で実際に vortex 対の解離の相転移が起きている事を強く示唆する。図8に  $T_c$  の直上と直下での典型的な vortex のスナップショットを示した。低温側では比較的少数の vortex 対が存在しているが、高温側では vortex の数が増すと同時に free vortex が現れ始める様子が見られる。

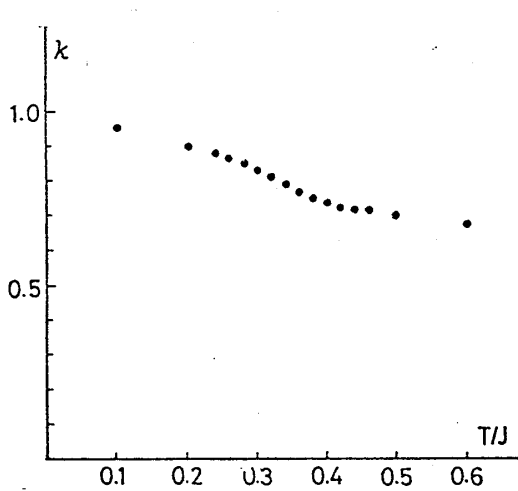


図5 Chirality の大きさの温度依存性。

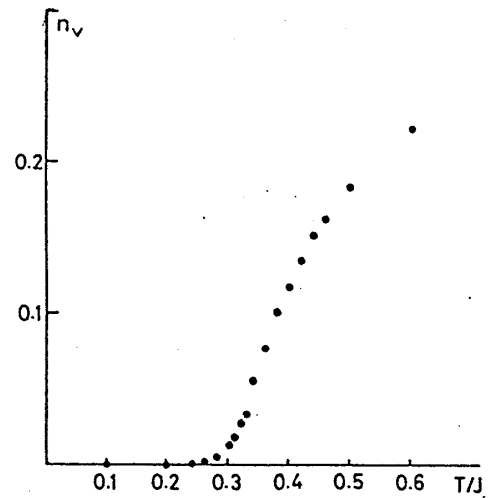


図6 vortex 数密度の温度依存性。

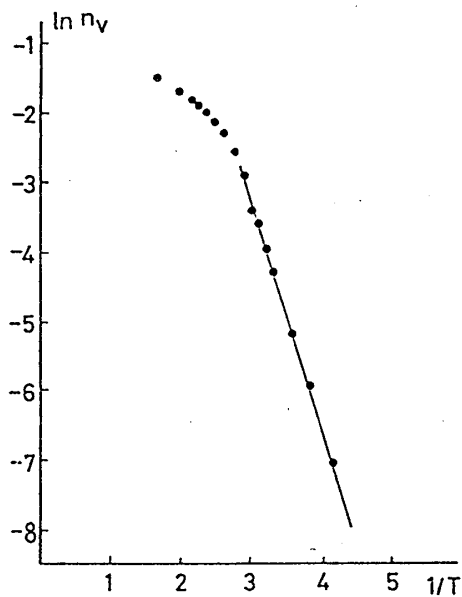


図7 vortex 数密度の対数の逆温度依存性。

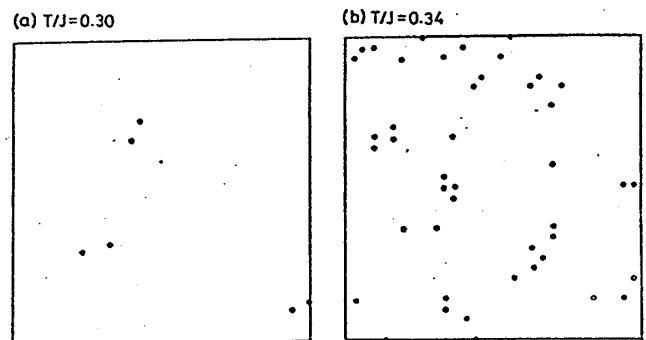


図8  $T_c$  の直上及び直下の典型的な vortex のスナップショット。

$T_c$  直上 ( $T/J=0.33$ ) で実際に熱平衡にある系での vortex の例を二つ 図9に示した。それぞれ (a) に各 plaquette 上での chirality の大きさと向き及び vortex の位置を (b) には対応するミクロなスピンの配位を示してある。

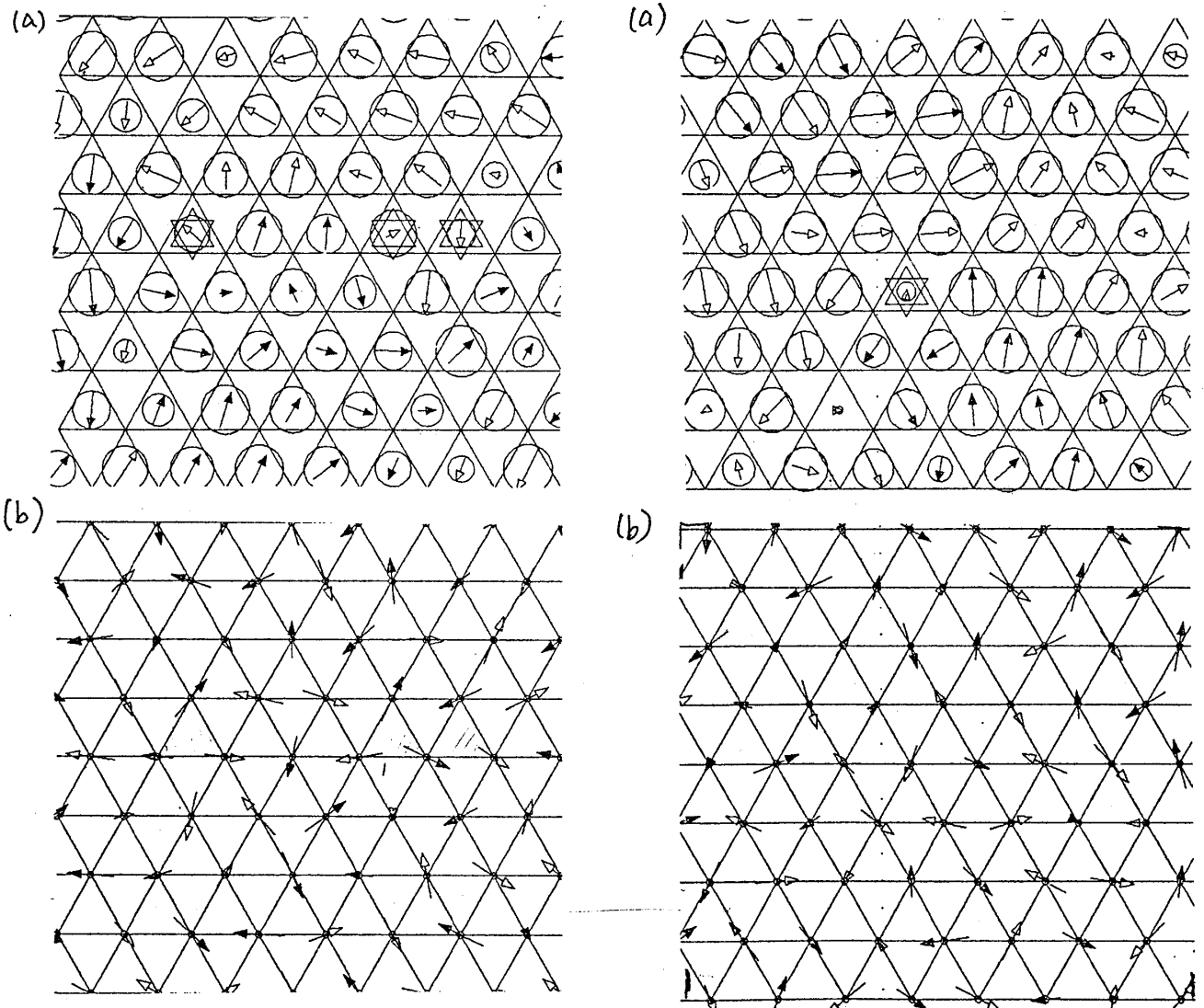


図10は帯磁率の温度依存性である。この量は相転移に比較的鈍感な量で興味ある温度領域では殆んど温度依存性を示さない。特徴的な事は低温相でも異方性が全く見られない点でこれは実験結果とconsistentである<sup>1)</sup>。図11は sublattice magnetization の2乗平均をいくつかの温度で系の linear dimension  $L$  に対してプロットしたものである。 $T_c$  の直傍で correlation length の急激な増加が認められるが、これは高温相に於いてはスピン秩序はスピン波及び vortex で効果的に乱されるのに対し低温相ではこれがスピン波のみになる為と解釈できる。ただし  $T_c$  以下でもたとえば  $T/J=0.32$  のデータを見ると  $L$  が大きい所で直線からのズレが認められ低温相でもスピン相関が指数関数的に減衰するという前記予想を裏付けている様に思われる。

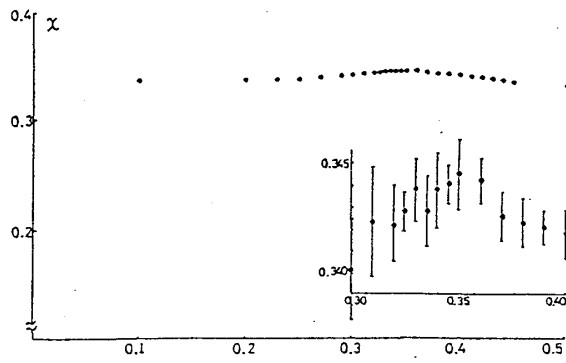


図10 帯磁率の温度依存性。

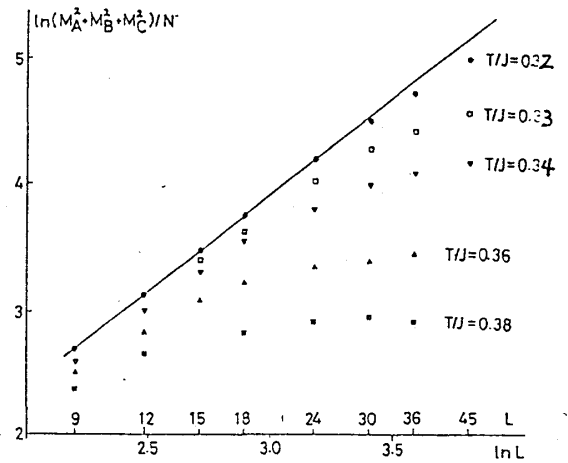


図11 sublattice magnetization の2乗平均のサイズ・温度依存性。

他方 この様な系の低温相でのスピンドYNAMICKSの問題は 種々の実験のタイ4スケールの問題とも関連して興味ある問題である。一例として個々のスピンの対する Edwards-Anderson オーダーパラメーター  $q$  :

$$q(t_n) \equiv \frac{1}{N} \sum_i \left( \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n s_i(t_m) \right)^2, \quad (N=L \times L)$$

の時間 (M.C. step) 依存性を図12に示した。時間とともに  $q$  が次第に減衰していく様子が見られる。  $T_c$  以下でも 観測する時間スケールによってスピンの長さの期待値が変化する事で 所謂スピングラスの振舞いに似ている。

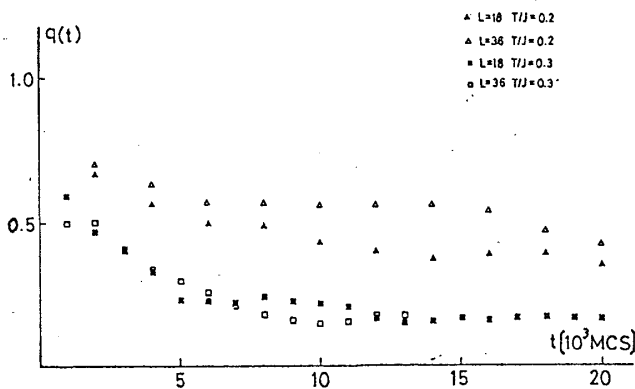


図12 Edwards-Anderson オーダーパラメーターの時間依存性。

以上の様に 二次元三角格子ハイゼンベルク反強磁性体は古典的な場合に限って も いくつかの興味深い性質を持った系と思われる。これは基本的には フラストレーションの効果により通常のハイゼンベルク磁性体とは異なったオーダーパラメーターを持つ事に起因している。

[文献]

- 1) K. Hirakawa, H. Ikeda, H. Kadowaki and K. Ubukoshi, J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1983) 2882.  
K. Takeda, K. Ubukoshi, T. Haseda and K. Hirakawa, preprint.  
M. Tanaka, private communication
- 2) H. Kawamura and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. 53 (1984) 9.  
H. Kawamura and S. Miyashita, in preparation.
- 3) N. D. Mermin Rev. Mod. Phys. 51 (1979) 591.
- 4) J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. of Phys. C 6 (1973) 1181.
- 5) S. Miyashita, H. Nishimori, A. Kuroda and M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 60 (1978) 1669; S. Miyashita, Prog. Theor. Phys. 63 (1980) 797 and 65 (1981) 1595  
J. Tobochnik and G. V. Chester, Phys. Rev. B 20 (1979) 3761.