

29. フラストレートした量子スピン系の秩序  
—量子モンテカルロシミュレーションによる研究—

本間重雄, 松田博嗣<sup>A</sup>, 荻田直史<sup>B</sup>, 佐野和博<sup>C</sup>  
[名大工, 九大理<sup>A</sup>, 理研<sup>B</sup>, 三重大教育<sup>C</sup>]

Frustration のある spin系の典型的な model は三角格子上の反強磁性体である。古典系な Ising model, XY model, Heisenberg model については厳密解や計算機実験により熱力学的性質は解明されている。これらに比べると量子スピン系の物性は未知の部分が多い。我々は量子性をもっとも顕著に現れる XY model ( $S=1/2$ ) をとりあげ、この熱力学的性質を decoupled cell method を用いたモンテカルロシミュレーションにより調べ、frustration と量子性が共存する系への理解を深くすることを目的としている。

具体的には次の熱力学量を求めた。

- (1) 内部エネルギー
  - (2) 比熱
  - (3) 磁化 部分格子構造があるとなれば部分格子磁化
  - (4) 磁化率
  - (5) スピンの対相関関数の温度依存性
- ( (3) - (5) はスピンの  $x$ -成分,  $z$ -成分について求めた。 )

得られた結果をまとめると

スピンの  $X$ -成分については

- (1) 対相関関数は指数関数的に減す。相関距離は  $T=0$  でも発散しない。
- (2) 系は3つの部分格子に別れるがこれは長距離秩序にはなっていない。
- (3) 磁化率は  $T=0$  で発散すると思われる。

スピンの  $Z$ -成分については

- (1) 対相関関数はやはり指数関数的に減す。低温では相関距離が  $X$ -成分のばあいよりも長くなりそうだ。
- (2) やはり3つの部分格子に別れるが長距離秩序にはなっていない。

このようにして得られた結果をより確実にするためにより大きい decoupled cell を用いてシミュレーションを行うことを計画している。