

積層三角格子反強磁性イジングモデルのモンテカルロ研究

— 中間相の秩序 —

東京工業大学 理工学研究科 轟木 義一, 上野 陽太郎
 東北大学 工学研究科 松原 史卓

積層三角格子反強磁性イジングモデルについて、CHB法とMCひねりの方法を用いて中間相の秩序を調べた。中間相は部分無秩序相であるという結果を得た。また、Kosekiらの結果で中間相に現れていた強い揺らぎは、高温側の転移点の強い漸近性の為にXY的な振舞いが現れていたことによるものだと結論した。

1 序論

積層三角格子反強磁性イジングモデル (STIモデル)

$$H = -\frac{J_0}{2} \sum_i \sum_{\lambda} S_{\lambda}^i S_{\lambda}^{i+1} - \frac{J_1}{2} \sum_i \sum_{\langle \lambda, \mu \rangle}^{nn} S_{\lambda}^i S_{\mu}^i - \frac{J_2}{2} \sum_i \sum_{\langle \lambda, \mu \rangle}^{nnn} S_{\lambda}^i S_{\mu}^i \quad (1)$$

を考える。ここで $S_{\lambda}^i = \pm 1$ であり、 \sum^{nn} は面内の最近接格子点についての和を \sum^{nnn} は面内の次近接格子点についての和を表す。このモデルは CsCoBr_3 や CsCoCl_3 のモデルハミルトニアンとしてよく知られているが、強いフラストレーションと次元性の為に従来のMCシミュレーションでは計算を行うのが難しかった。最近、KosekiとMatsubaraは彼らの開発したクラスター熱浴法 (CHB法) を用いることによってこの困難を克服し、実験より推定した値 $J_1/J_0 = 3 \times 10^{-2}$ 、 $J_2/J_0 = -1 \times 10^{-4}$ を用いて計算し比熱や転移温度などが実験と非常によく合う結果を得た [1]。しかし、彼らの結果にも疑問点が残っていた。彼らの結果は、 T_{N1} と T_{N2} ($T_{N1} \sim 0.367$ 、 $T_{N2} \sim 0.180$) において逐次転移をし、 $T < T_{N2}$ ではフェリ磁性相が現れ、 $T_{N1} < T < T_{N2}$ では三つの副格子磁化のうち一つが秩序化しない部分無秩序相 (PD相) が現れるというものだったが、中間温度領域に非常に強い揺らぎが存在する事からPD相の安定性に疑問に残っていた。

一方で、STIモデルは3状態反強磁性Pottsモデル (3AFPモデル) や6状態一般化クロックモデル (6GCLモデル) と同じ $3d Z_6$ 対称性を持つ。最近の理論的研究の進展により3AFPモデルと6GCLモデルは非常によく対応していることが解り $3d Z_6$ 対称性モデルの統一的理解の可能性が強まってきた。この3AFPモデルと6GCLモデルのような対応は当然、積層三角格子強磁性イジングモデルについても期待される。

そこで、本講演ではSTIイジングモデルの中間相はPD相であるか、また、もしPD相であるなら、強い揺らぎはなぜ現れたのかをCHB法とMCひねりの方法を用いてシミュレーションを行ない、他の $3d Z_6$ 対称性を持つモデルと対応づけて議論をした。

2 他の 3d Z_6 対称性モデルについての最近の研究

Oshikawa は繰り込みによって 3d Z_6 モデルの高温側の転移点は 3d XY 普遍クラスに属する事を示した。さらに、3AFP モデルについて基底状態の BSS 相と呼ばれる PD 相に対応する相の他に中間温度領域に別の相が現れるかどうかの問題になっていたが、Oshikawa は MC シミュレーションで現れた中間相は高温側の転移点の強い漸近的な振舞いによる有限サイズ効果である可能性を指摘した [2]。Kishi は MC ひねりの方法によって剛性指数のサイズの依存性を調べることにより中間相に XY 的な相が現れるがその領域はサイズを大きくするに従って低温側から減少する事を確かめた [3]。

6GCL モデルについては、かなり以前であるが、Ueno と Kasano は MC ひねりの方法を用いて以前に計算し中間相として二つの相 (IOP1 と IOP2) が存在するを得ていた [4]。なお IOP1 は PD 相に対応し、IOP2 は必要な境界条件の種類が不十分なために得られた誤った結果であることが (後述の) STI モデルと同様の計算で判明した (この研究は別個に発表予定)。

3 シミュレーション結果

はじめに、中間温度 $T/|J_0| = 0.3$ 、サイズ $30 \times 30 \times 1250$ において c 軸に平行な境界の一对を周期境界条件とフェリ的な境界条件にし、副格子の緩和を見る事によって PD 相の安定性を調べた。ただし、初期状態を PD にし、スピントリップには CHB 法を用いた。 c 軸に平行な境界の一对を周期境界条件のまま緩和させた場合を図 1(a) に、それをフェリ的な境界条件に変えて緩和させた場合を図 1(b) に示す。周期境界条件のまま緩和させた場合は PD 相に落ち着いているが、フェリ的な境界条件変えて緩和させた場合は 6GCL モデルでの IOP2 に対応した相に落ち着く。このように境界条件によって PD 相が壊れてしまう事から PD 相は安定ではないように見える。

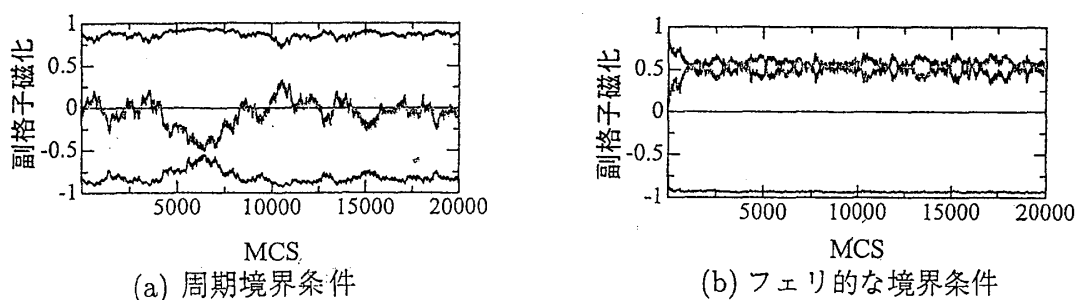
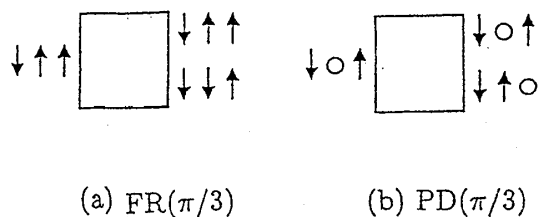


図 1: c 軸に平行な境界の一对の境界条件を変えた時の副格子磁化の時間依存性

次に MC ひねりの方法を用いて調べた。境界条件は図 2 のような 2 つの境界条件を調べた。このような境界条件で計算し剛性指数 ψ を求める事で表 1 のような 5 つの相を調べる事ができる。ここでサイズは $3n \times 3n \times 125n$ ($n = 2 \sim 4$) を考え、それぞれの温度に対して $2000n$ MCS 計算した。スピントリップは CHB 法を用いた。図 1 に剛性指数 ψ の温度依存性の計算結果を示す。FR($\pi/3$) も PD($\pi/3$) も剛性指数は 1 に近い値を取っている。これより中間相は XY 相が現れている事がわかる。



	DO	PD	IOP2	XY	Ferri
FR($\pi/3$)	負	負	正	1	2
PD($\pi/3$)	負	正	負	1	負

表 1: 各相に対する剛性指数の値

図 2: MC ひねりの方法に用いた境界条件

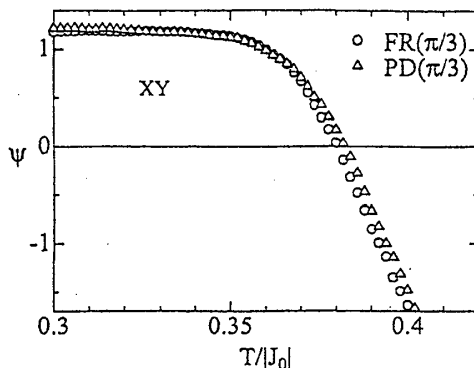


図 3: 剛性指数の温度依存性

この中間相に現れた XY 相は他の 3d Z_6 モデルとの対応から有限サイズ効果によって現れているのだと考えられる。また、サイズを大きくしていくに従って低温側から XY 的な領域が減少していくと考えて、 $T/|J_0| = 0.3$ よりさらに低温の $T/|J_0| = 0.25, 0.275$ 、において図 1(b) のように c 軸に平行な境界の一对をフェリ的な境界条件にして緩和させた場合についてサイズ $3n \times 3n \times 125n$ ($n = 5, 10, 15$) と変えて調べた。その結果を図 4 に示す。 $T/|J_0| = 0.25$ では $n = 5$ では IOP2 相が現れているが、 $n = 10, 15$ と変えていくに従って、PD 相に近付いていくのが解る。 $T/|J_0| = 0.25$ では $n = 5, 10$ では IOP2 相が現れているが、 $n = 15$ では壊れている。従って、中間温度領域に現れる XY 相は高温側の転移点における非常に強い漸近性によって現れたのだということが解る。

4 まとめ

STI モデルの中間相は XY 的漸近性が非常に強いために大きなサイズも真の熱平衡相は現れず、また、境界条件にも敏感である事が判明した。そのため、従来の研究では誤ったり偶然に正しい結果を得たようである。このことから、Koseki らが得た PD 相でのマクロな大きなゆらぎは PD 相は周期境界条件で生じただけで、彼らのサイズでもまだ安定性はなく、漸近的 XY 性が強く残っていたからだと考えられる。

3d Z_6 対称の 3 つのモデルの中間相は今回の研究から、結局、互いに等価な PD 相、IOP1、BSS 相であることが判明した。なお、これらの等価な相が軟らかい XY 相 ($\psi = 1$) に極めて近いことは、PD 相がはじめに考えられていた秩序ではなく、IOP1 描像 [4] と合致していることを指摘したい。

しかし、中間相が PD 相だとすると二つの疑問点が挙げられる。

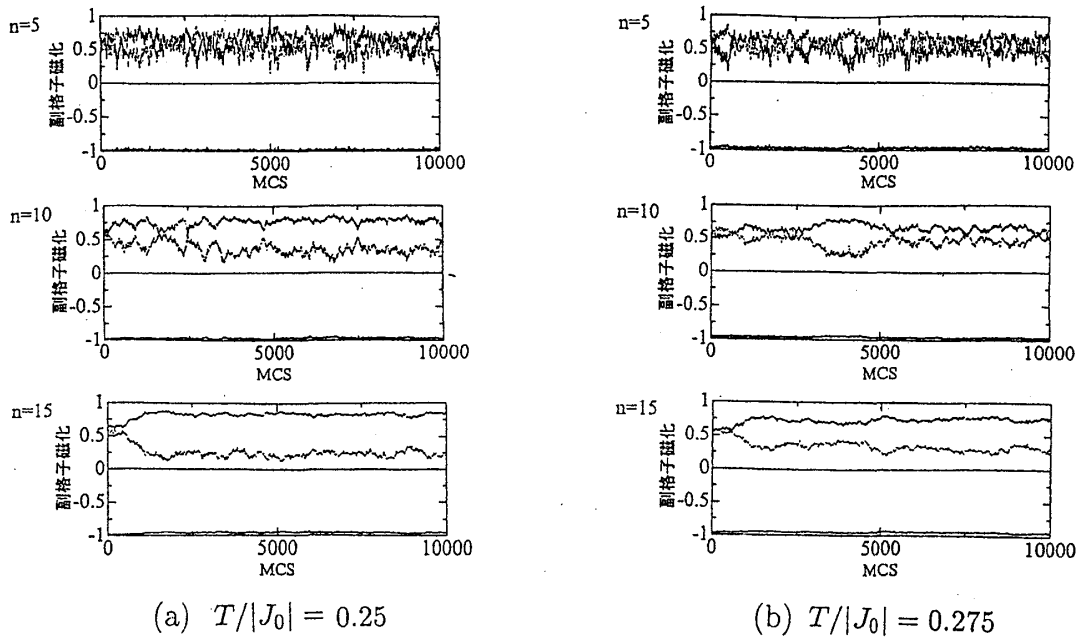


図 4: c 軸に平行な一対の境界を Ferri 的にした時の副格子磁化のサイズおよび時間依存性

1. ClCoBr_3 や ClCoCl_3 の実験でも強い揺らぎが現れているのはなぜか？
2. 低温側の転移点はどうなっているか？

1. については実際の不純物等で有限のドメインに分割されているため XY 的な振舞いが生じているのだと考えている。2. については何の変化も生じない比熱から二次転移だと考えられるが、対称性より二次転移という事は考えられない。低温側の相転移がどうなっているかは今後の課題である。更に、軟らかい中間相の秩序も今後の課題である。

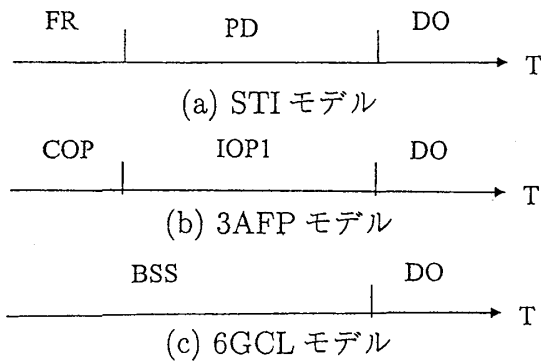


図 5: 他の Z_6 モデルの相図

STI	3AFP	6GCL
PD	BSS	IOP1
Ferri	なし	COP

表 2: それぞれのモデルの対応する相

参考文献

- [1] O. Koseki and F. Matsubara: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000), 1202.
- [2] M. Oshikawa, Phys. Rev. B **61** (2000) 3430.
- [3] R. Kishi, Master thesis. Tokyo Institute of Technology (1999).
- [4] Y. Ueno and K. Kasano, Phys. Rev. B **48** (1993), 16471.