

二次元希釈反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態相転移

東大物性研	藤堂眞治、加藤清、高山一
京大情報	原田健自
都立大理	川島直輝
東大工	宮下精二

二次元正方格子上的量子反強磁性ハイゼンベルグ模型は、基底状態において長距離ネール秩序を持つ。この系における静的な非磁性不純物の影響は、量子ゆらぎとランダムネスの競合という観点からも非常に興味深い問題であり、実験、理論の両面から研究が行なわれている。実験的には、 $S = 5/2$ の反強磁性体である K_2MnF_4 と $S = 1/2$ の La_2CuO_4 とでは、非磁性原子による希釈に対して定性的に全く異った振舞が見い出されている [1]。すなわち、前者ではパーコレーション閾値近傍 (磁性原子の濃度 $\sim 60\%$) まで基底状態における長距離秩序が残っているのに対して、後者では磁性原子の濃度が 80% 程度となった所で長距離秩序が消失することが示唆されている。

理論的には、実験で見られる定性的な振舞の違いはスピンの大きさによって量子ゆらぎの強さが異なるためであると説明されてきた。実際、これまでの二次元正方格子上的希釈量子反強磁性ハイゼンベルグ模型についての量子モンテカルロ法を用いた解析 [2]、コヒーレントポテンシャル近似や非線型シグマ模型を用いた解析 [3, 4]、いずれにおいても $S = 1/2$ の系における「量子ゆらぎによる非秩序状態」の存在が示唆されているが、確定的な結果は得られていない。

我々は、この二次元正方格子上的希釈反強磁性ハイゼンベルグ模型について、基底状態における量子相転移に焦点を絞り、量子モンテカルロ法による詳しい解析を行なった [5]。ハミルトニアンは以下の式で与えられる。

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

ここで、 $\{\epsilon_i\}$ は格子点毎に独立に確率 p で 1、 $(1-p)$ で 0 の値を取る。すなわち、 p は磁性原子の濃度を表わす。古典極限 ($S \rightarrow \infty$) では、この系は基底状態においてサイトパーコレーション模型と等価であり、臨界濃度 p_{cl} は、 $p_{\text{cl}} = 0.5927460(5)$ と求められている。我々は、「一般の S に拡張された連続虚時間ループアルゴリズム」を用い、 $S = 1/2, 1, 3/2, 2$ の場合を調べた。このアルゴリズムを用いることにより、以前行なわれた量子モンテカルロ法による研究 [2] と比較して、非常に大きな系 ($L \times L \leq 48 \times 48$) の非常に低温 ($T \simeq 0.001J$) における物理量を精度よく求める事が可能となった。

最初に、この系の長距離秩序を特徴づけるスタッガード磁化 $M_s(p)$ の解析を行なった。まず、 $p > p_{\text{cl}}$ の数点において、 $\vec{k} = (\pi, \pi)$ における静的構造因子 $S_s(L, T, p)$ を十分低温において精度良く評価し、熱力学的極限 ($L \rightarrow \infty$) への外挿を行なった。非磁性原子のない場合 ($p = 1$) には、無限系の値への補正は $O(1/L)$ である事がスピン波理論により示されているが、 $p < 1$ においても、データの振舞は $1/L$ に関して十分に直線的である事から、この場合にも基底状態はギャップレスな励起を伴う秩序状態である事がわかる。このようにして得られた基底状態のスタッガード磁化を図 1 に示す。 $S = 1/2, 1$ のいずれの場合

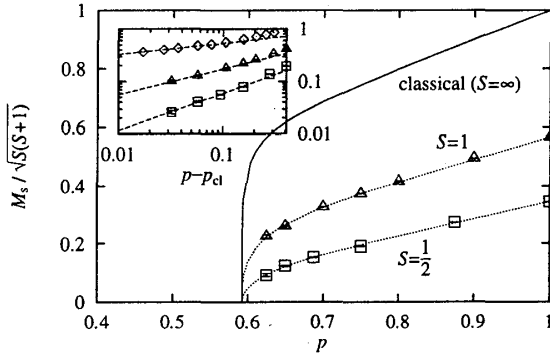


図 1: $T = 0$ におけるスタグダード磁化 $M_s(p)$ の濃度依存性。

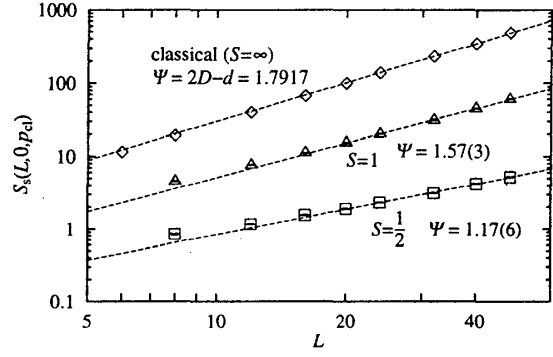


図 2: $p = p_{cl}$ における静的構造因子 $S_s(L)$ のシステムサイズ依存性。

においても、 $p \geq 0.625$ でスタグダード磁化は明らかに有限の値を持つ。さらに、スタグダード磁化が $p = p_{cl}$ にむかって $M_s(p) \sim (p - p_{cl})^\beta$ のように冪的に減衰していく事 (図 1)、また $p = p_{cl}$ における $S_s(L)$ が L に関して $S_s(L) \sim L^\Psi$ のように冪的に増加している事 (図 2) から、量子系の場合においても臨界濃度 p^* は S によらず古典系の臨界濃度 p_{cl} と等しい事が結論される。しかし一方で、図 1、2 から評価された臨界指数 (β および Ψ) は、古典系の値 ($\beta = 5/36$, $\Psi = 43/24$) と一致しないばかりでなく、明らかにスピンの大きさ S に依存している。

これらの結果を理解するため、 $p = p_{cl}$ における量子相転移に対して以下に述べるスケーリングの仮定を行ない、量子モンテカルロから得られたデータの解析を行なった。

まず、転移点直上 $p = p_{cl}$ では、スピンの作るクラスターは全てフラクタル次元 $D = 91/48$ を持つ。これらのフラクタルなクラスターのうち、同一のクラスターに属するスピンの相関関数 $C(r)$ は、量子ゆらぎの効果によって指数 α で冪的に減衰すると仮定する (古典系では $\alpha = 0$)。一方、 $p > p_{cl}$ では、有限のクラスター特性長 $\lambda(p)$ が存在し、この長さのスケールよりも小さなクラスターはフラクタルな次元 D を持つのに対し、このスケールよりも大きなクラスターは普通の次元 ($d = 2$) を持つ。この特性長 $\lambda(p)$ は臨界点近傍で指数 ν で発散する ($\nu = 4/3$)。 $p > p_{cl}$ ではギャップレスな励起を伴う長距離秩序が存在することから、この系の臨界現象を特徴付ける長さのスケールとしては、クラスターの特性長 $\lambda(p)$ 以外には存在しないと考えるのが自然である。これらの臨界特性に関する仮定、および、パーコレーション理論により得られる、クラスターの大きさの分布についての臨界特性を用いると、静的構造因子に関して以下のような有限サイズスケーリング則が得られる。

$$S_s(L, T, p) \sim L^{2D-d-\alpha} \tilde{S}_s(L^{1/\nu}(p - p_{cl}), L^z T), \quad (2)$$

ここで、 D 、および ν はパーコレーション理論から得られる古典的な指数であるが、 α は S に依存する量子系特有の臨界指数であり、先に導入した指数 Ψ とは $\Psi = 2D - d - \alpha$ のスケーリング関係式により結びつけられる。また、温度 T のスケーリングに関しては S に依存する動的臨界指数 z を導入し、通常の冪的な振舞を仮定した。

実際、 $p = p_{cl}$ における有限温度の静的構造因子 $S(L, T, p_c)$ は、式 (2) でよくスケールされ、 $S = 1/2, 1, 3/2, 2$ に対して、それぞれ、 $\Psi = 1.27(2), 1.57(3), 1.60(3), 1.69(7)$ 、また $z = 2.54(8), 1.58(10), 1.55(10), 1.31(20)$ が得られる。さらに Ψ と β を関係付けるスケーリング則 $2\beta = (d - \Psi)\nu$ を用いると、 $S = 1/2, 1$ に対してそれぞれ $\nu = 1.2(1), 1.5(2)$ と求まり、古典系の値 $\nu = 4/3$ と数値精度の範囲で一致する。

以上のように、量子モンテカルロ法を用いた解析により、二次元正方格子上の希釈反強磁性ハイゼンベルグ模型に関して、

- 臨界濃度は S の値によらず、古典的なパーコレーション閾値に等しい
- 一方、臨界濃度における量子相転移の臨界指数は S の値に依存し、単調に変化する

という結果を得た [5]。我々の結果は、これまでの近似理論による結果 [3, 4] とは定性的に異なっており、近似に不十分な点がある事を示している。さらに、実験の結果 [1] とも定性的に異なっているが、これは、現実の物質においては、我々の模型に取り込まれていない効果 (次近接相互作用によるフラストレーションの効果など) が本質的に重要な役割を果たしていることを示唆しており、実験結果を説明するためには、これらの効果を正しく取り込んだ模型を扱う必要があると考えられる。

最後に、スピンの大きさ S に依存する量子臨界現象が検証されたのは、我々の知る限り本研究が初めてである。この新たな「非ユニバーサル性」の発現のメカニズムは非常に興味深い問題であり、今後のさらなる研究が望まれる。

なお、本研究におけるシミュレーションは、主に筑波大学の CP-PACS、東大大型計算機センターの SR-2201、東大物性研の RANDOM 上で行なわれた。本研究は、筑波大学計算物理学センターの「大規模数値シミュレーションプロジェクト」、および日本学術振興会の「未来開拓学術研究推進事業 (計算科学)」からのサポートを受けて行なわれた。

参考文献

- [1] S.-W. Cheong *et al.*, Phys. Rev. B **44**, 9739 (1991).
- [2] S. Miyashita, J. Behre, and S. Yamamoto, in *Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics*, ed. M. Suzuki (World Scientific, Singapore, 1994) p. 97.
- [3] C. Yasuda and A. Oguchi, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 2836 (1997). C. Yasuda and A. Oguchi, to appear in J. Phys. Soc. Jpn.
- [4] Y. C. Chen and A. H. Castro Neto, preprint (cond-mat/9903113).
- [5] K. Kato, S. Todo, K. Harada, N. Kawashima, S. Miyashita, and H. Takayama, preprint (cond-mat/9905379).