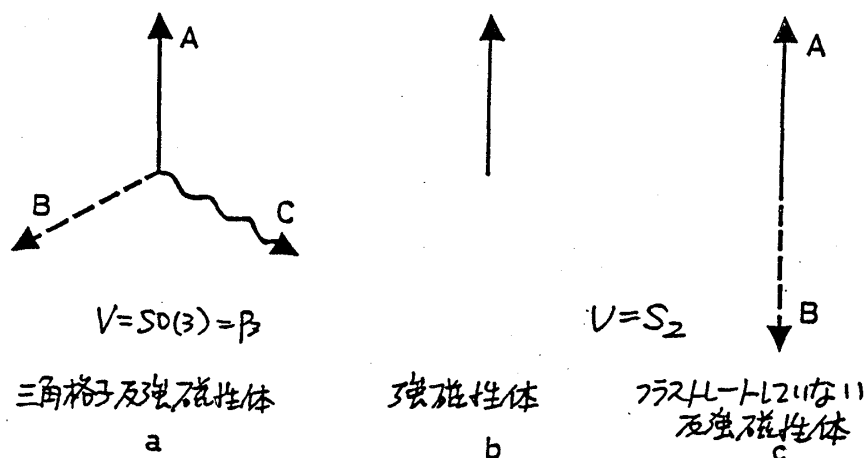


三角格子ハイゼンベルク反強磁性体の相転移と新しいユニヴァーサリティ クラス阪大・教養 川村 光

近年所謂「フラストレート磁性体」の相転移が理論・実験両面から研究されている。三角格子反強磁性体はその典型的例であり、規則系である事からスピングラス等のランダム系に比して問題を著しく単純にしている。以下ではハイゼンベルクスピン系を対象としフラストレーションの効果が連続スピン系の相転移にどのような影響を及ぼすかについて簡単に述べたい。結論から言うと、この系では空間次元が2あるいは3のそれぞれの場合について、通常のフラストレートしていない系での相転移とは全く様相を異にした新しいユニヴァーサリティクラスの相転移が起きている可能性が極めて濃厚である。

相転移を考える際最も大切な概念の一つに秩序相の対称性が挙げられる。通常の強磁性体の場合にはこれはスピンの成分数 n で表現される。即ち $n=1, 2, 3$ に対応して各々アイジング、XY、ハイゼンベルクモデルが対応し、さらに空間次元や相互作用のレンジによって相転移が規定されるというのがユニヴァーサリティの考え方である。ところがフラストレート系の場合にはスピンの成分数 n だけではその対称性を表現するのに十分ではない。三角格子上のハイゼンベルク反強磁性体の場合、古典系の話に限ればその基底状態は所謂 120° 構造になる(図1a)。ここで各副格子スピンの向きが互いに傾いている(カントレている)点が極めて重要であり、スピン配列が *co-linear* な強磁性体(図1b)やフラストレートしていない反強磁性体(図1c)と異なっている。この秩序の対称性を表現する際、単なるスピンの成分数に代えて、オーダーパラメーター空間という概念を導入すると便利である。我々の系は三次元スピン空間内の座標系ないしは剛体と同じ自由度を持っている為 $V=SO(3)=P_3$ (P_3 : 射影空間)であり、フラストレートしていないハイゼンベルクモデルでは $V=S_2$ (S_2 : 球面)となる。(一般に通常のフラストレートしていない成分ハイゼンベルクモデルのオーダーパラメーター空間は $V=S_{n-1}$ である。) ここで $SO(3)=P_3$ という空間が球面 S_2 と異なり単連結でないという点が以下の議論に重要な

図1



なる。結局 我々の系が通常のフラストレートでないスピン系とは全く異なった特性 (SO(3) 対称性) を持つ以上 新しい臨界現象の出現が期待できる。以下では二次元及び三次元 (層状三角格子) の双方の場合について モンテカルロシミュレーションに基づいた解析の結果を紹介する。

I) 二次元系

系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad J > 0, \quad \vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z) \text{ with } |\vec{S}_i| = 1,$$

で与えられる。相互作用は全2最近接。二次元の連続スピン系では Mermin-Wagner の定理によりスピンの長距離秩序はない事は判っている。極めて興味深い相転移を示すのが XY モデルで、この場合は帯磁率が発散する低温相へ所謂 Kosterlitz-Thouless 型の相転移が起き、これが渦対の解離によるものとする KT 理論が現在広く受け入れられている。ところでトポロジカルに安定な渦が存在するという事と系のオーダーパラメーター空間が単連結でないという事は実は同義である。ということは我々のモデルのオーダーパラメーター空間も単連結でないから安定な渦が存在する。この辺りの議論にはトポロジー (ホモトピー群) の手法が便利であるが 細部は省略して結論を述べると 我々の系はパリティに対応する二価のトポロジカル量子数 (Z_2) で特徴付けられる安定な渦 (Z_2 渦) を持つ。4 ヤージに対応するトポロジカル量子数 (Z_4) で特徴付けられる通常の XY モデルの渦とはやや異なった渦である。この渦を表現するのに便利な量として各三角形上で定義されるカイラリティベクトル $\vec{\chi} = \frac{2}{3\sqrt{3}}(\vec{S}_1 \times \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \times \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \times \vec{S}_1)$ がある。エネルギー的に有利な Z_2 渦はカイラリティベクトルが渦構造を作るタイプのものであり一例をモンテカルロのスナップショットの中から図2に示した。この渦が単独で存在する時のエネルギーは系の

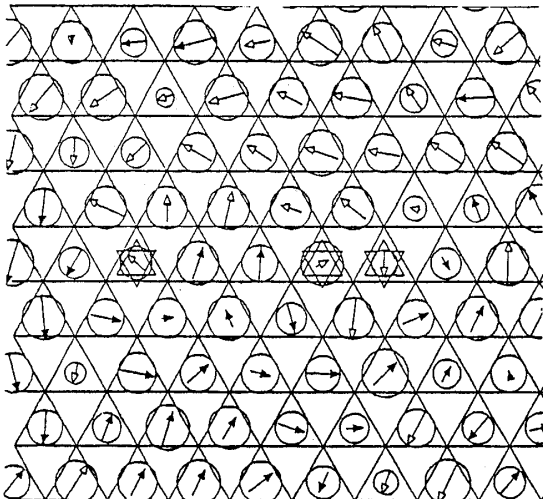


図2 Z_2 渦のスナップショット。矢印はカイラリティベクトルの投影を表す。★が渦。

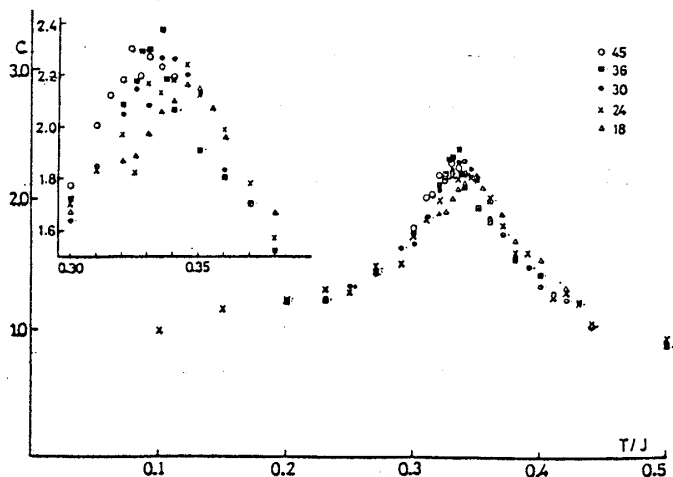


図3 比熱のサイズ・温度依存性

サイズに対して対数的に発散している為 通常のXYモデルと類似のKT機構が存在する。即ち系は渦対の解離による相転移を示すものと予想される。図3に比熱を示したがこれはフェロのXYモデルの比熱の振舞いと極めて良く似ており また渦の数密度や直接観測から $T \approx 0.33J$ で渦対の解離による相転移が示唆される。XYモデルの場合には低温相で帯磁率が発散していたが、今の場合低温相でもスピン相関は指数的に減衰しかつ相関長は有限と予想される。(トポロジーの議論から低温相は $n=4$ のフェロのハイゼンベルグモデルと同じ対称性を持つものと予想される。) その場合 高温相と低温相を定性的に区別する量は一体何なのかという問題が生じる。一つの候補として十分に大きなループ上で定義された vorticity function $V[C]$ の漸近形が考えられる。即ちループ内の渦の個数が偶数か奇数かで ± 1 をとる量の熱平均が ループ長 $L \rightarrow \infty$ の極限で

$$\langle V[C] \rangle \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \begin{cases} \sim \exp(-\alpha A) & T > T_c \quad (\text{面積則}), \\ \sim \exp(-\beta L) & T < T_c \quad (\text{線則}), \end{cases}$$

に従うかどうかで相を判定する。この関係は渦解離の仮定の下に導出する事が出来るが、結果は格子ゲージ理論のワークの閉じ込めの判定規準と類似のものになっており その内の関係がどうなっているかは極めて興味深い。

II) 三次元系

三次元の場合には有限な長距離秩序を持った低温相への相転移が予想される。しかしながら先の対称性の議論により今迄のユニヴァーサリティには属さない相転移が起きる可能性が強く、もしそれが二次転移であれば一連の新しい臨界指数で特徴付けられるはずである。この点に関してはモンテカルロシミュレーションと有限サイズスケーリングを組み合わせる事により多くの知見が得られる。図4に比熱、立方格子上のフェロのハイゼンベ

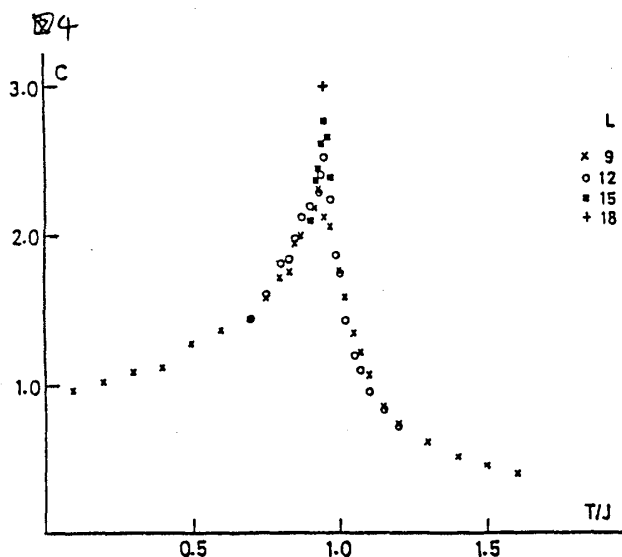


図4 比熱

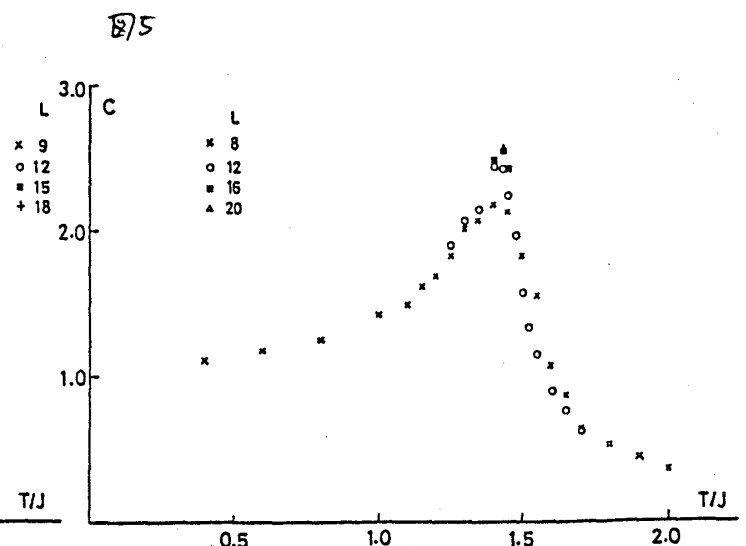


図5 立方格子上のフェロの比熱

ルクモデルの比熱 (図5) と比べて示した。フェロの場合はカスプであるが アンチフェロでは強い発散が観測された。図6・7に各々 オーダーパラメーター (副格子磁化) 及び オーダー帯磁率に対する有限サイズスケーリングプロットを示した。以上から得られた各臨界指数を通常の場合と比較させて表にまとめた。New Universality Class !!

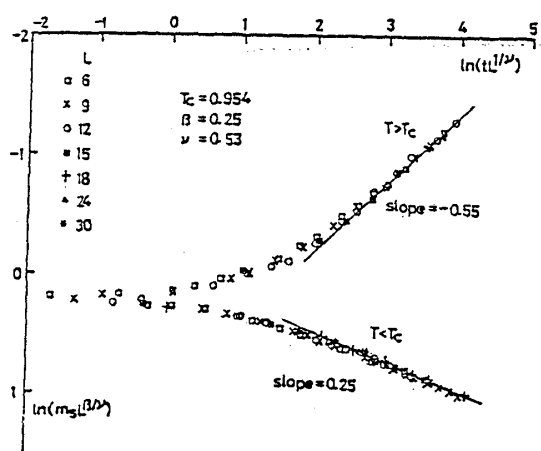


図6 オーダーパラメーターの有限サイズスケーリングプロット

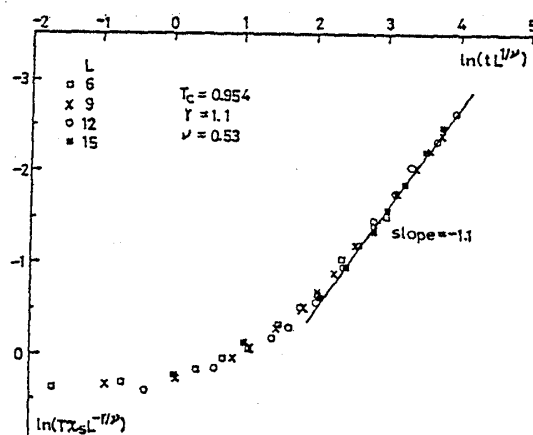


図7 オーダー帯磁率の有限サイズスケーリングプロット

	α	β	γ	ν
Ising	~ 0.125	~ 0.31	~ 1.25	~ 0.64
XY	~ 0	~ 0.33	~ 1.33	~ 0.67
Heisenberg	~ -0.1	~ 0.35	~ 1.4	~ 0.7
SO(3)	~ 0.4	~ 0.25	~ 1.1	~ 0.53

〔三次元系の各ユニバーサリティクラスの臨界指数〕

文献

- 1) H. Kawamura & S. Miyashita, J. Phys. Soc. Japan 53 (1984) 9, 4138.
二次元系
- 2) H. Kawamura & S. Miyashita, J. Phys. Soc. Japan 54 (1985) 4530.
磁場中の二次元系
- 3) H. Kawamura, J. Phys. Soc. Japan 54 (1985) 3220 & 投稿準備中.
三次元系
- 4) H. Kawamura, submitted to J. Phys. Soc. Japan.
繰り込み群 (E 雇用)