

擬二次元ハニカム格子反強磁性ハイゼンベルグ模型における ネール温度の量子モンテカルロ法による研究

発表者 上原 大河

指導教員 安田 千寿

反強磁性体の研究によく使われる模型に「最近接スピン間相互作用からなる反強磁性ハイゼンベルグ模型」がある。この模型のハミルトニアンは $\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ と書ける。ここで、 \mathbf{S}_i は i サイト上のスピン演算子、 J_{ij} はスピン間の交換積分、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は最近接ボンドの和を意味する。マーミンワグナーの定理により、二次元反強磁性ハイゼンベルグ模型は有限温度では長距離秩序を持たないが、実際の物質を記述する擬二次元反強磁性体においては弱い面間相互作用が存在することから、有限のネール温度以下で反強磁性長距離秩序を示す。

擬二次元正方格子反強磁性ハイゼンベルグ模型の量子モンテカルロ法による先行研究 [1] では、ネール温度 T_N の面間相互作用 J' 依存性が評価された。量子力学的効果を摂動論的に取り入れた乱雑位相近似 (RPA) では、二次元系のスタッガード帯磁率 $\chi_s(T)$ と配位数 $z = 2$ を用いて、 $zJ'\chi_s(T_N) = 1$ の関係が成り立つことが分かっている。先行研究 [1] では、量子モンテカルロ法で得られた T_N と $\chi_s(T)$ から $\zeta \equiv 1/(J'\chi_s(T_N))$ を評価した結果、 J'/J の値が小さい領域で ζ/z が 0.65 となる結果を得た。ここで、 J は面内相互作用の交換積分である。この $\zeta = 1.3$ の値は RPA における値 $z = 2$ よりも小さく、RPA では取り入れられなかった量子力学的効果が ζ に繰り込まれたと解釈できる。この ζ のことを「繰り込まれた配位数」と呼ぶ。

近年、ハニカム格子磁性体の研究が盛んになっている。基底状態が厳密に量子スピン液体であるハニカム格子キタエフ模型 [2] や有限温度で多重 q 秩序状態などの多様な状態を示す磁場中 J_1 - J_2 模型 [3] の研究などである。実際の物質においては、固体ヘリウム薄膜における実験から新しい量子スピン液体が見つかった [4]。この薄膜はグラファイト表面を重水素化水素でコーティングしたことで実現した単原子層で、低密度であることからヘリウム原子がハニカム格子を形成していることが予想される。また、金属錯体とフェルダジルラジカルを組合わせた多様な物質合成が可能となり、いくつかのハニカム格子磁性体が提案され [5]、ランダムに共存した数種類の相互作用の存在が示唆されている。このような状況を受け、本研究では、スピン $S = 1/2$ の擬二次元ハニカム格子反強磁性ハイゼンベルグ模型における繰り込まれた配位数を連続虚時間ループアルゴリズムの量子モンテカルロ法 [6] を用いて調べた。最近接相互作用のみを考えた場合、ハニカム格子には幾何学的フラストレーションはないことから、量子モンテカルロ法による数値的解析が可能である。連続虚時間ループアルゴリズムでは、相関長程度のサイズを持つクラスターによる状態更新を実現することにより、従来の量子モンテカルロ法に比べて格段に効率的なシミュレーションを実行できる。

擬二次元ハニカム格子反強磁性ハイゼンベルグ模型のネール温度を有限サイズスケール解析で評価した結果、ネール温度 T_N と面間相互作用 J' に図 1 のような $T_N \propto 1/(b - \ln(J'))$ の関係があることが確認された。ただし、面内の交換積分を $J = 1$ として、エネルギーの単位に取っている、また b は定数である。さらに、そのネール温度における二次元系のスタッガード帯磁率を評価することにより、繰り込まれた配位数を評価した。その結果、図 2 のように J' の小さい領域で $\zeta/z \sim 0.65$ になる傾向があることが確認された。今後、さらに小さい J' での計算を実行して確認する必要があるが、正方格子とハニカム格子の両結果において $\zeta/z \sim 0.65$ となることは、 ζ が格子に依存しない普遍的な量であることを示している。本講演では、量子モンテカルロシミュレーションや有限サイズスケール解析の結果を詳細に説明する。

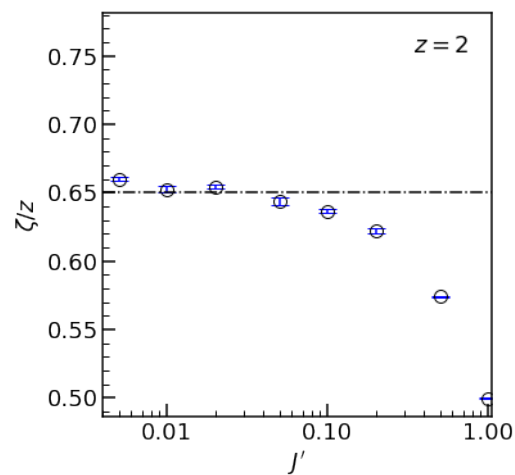
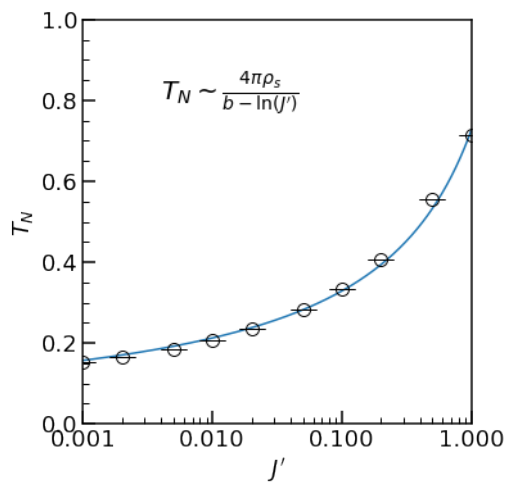


図 1: ネール温度 T_N の面間相互作用 J' 依存性. 青線は関数 $f(J') = 4\pi\rho_s/(b - \ln(J'))$ で $\rho_s = 0.11$, $b = 1.9$ である.

図 2: 繰り込まれた配位数 ζ の面間相互作用 J' 依存性. 一点鎖線は $\zeta/z = 0.65$ を示す.

[1] C. Yasuda, S. Todo, K. Hukushima, F. Alet, M. Keller, M. Troyer, and H. Takayama, Phys. Rev. Lett. **94**, 217201 (2005).

[2] A. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).

[3] T. Shimokawa and H. Kawamura, Phys. Rev. Lett. **123**, 057202 (2019).

[4] 福山 寛, 日本物理学会第 74 回年次大会シンポジウム「ヘリウム単原子層の量子物性—最近の進展—」(2019).

[5] Y. Kono, T. Okabe, N. Uemoto, Y. Iwasaki, Y. Hosokoshi, S. Kittaka, T. Sakakibara, and H. Yamaguchi, Phys. Rev. B **101**, 014437 (2020).

[6] S. Todo and K. Kato, Phys. Rev. Lett. **87**, 047203 (2001).