

層状反強磁性体の三次元秩序と新しいユニバーサリティ・クラス

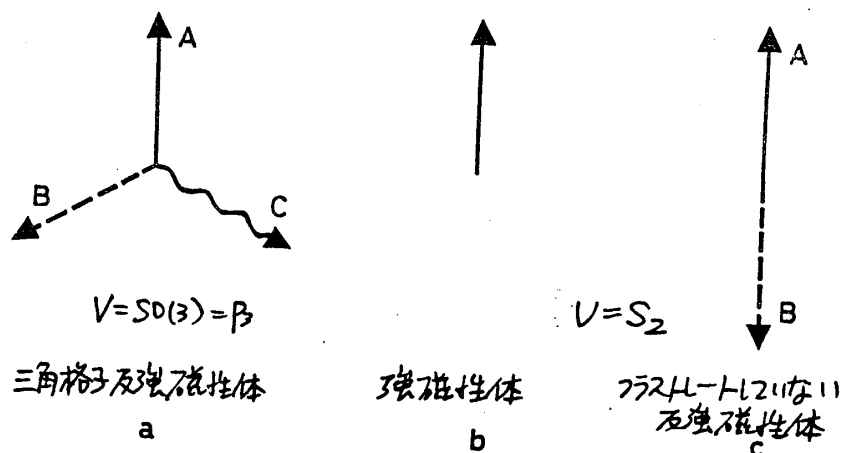
阪大・教養 川村 光

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。代表的例は三角格子反強磁性体であるが、この系の系はフラストレートした三角格子面が互に軸方向にスタックした構造になり、弱く（場合によらず強く）面内の結合を持った三次元系になっている。実験・中性子散乱等の実験により、多くの層状磁性体は低温で三次元秩序を形成する事が判っている。

筆者らは以前、二次元三角格子上の古典ハイゼンベルグ反強磁性体と抗か、ホモトピー解析とモンテカルロシミュレーションの結果に基づいて、この系が有限温度で存在するフェロの（フラストレートしていない）ハイゼンベルグモデルでは見られないうような相転移を示す事を見出した。¹⁾ 即ちこの系は安定なトポロジカル励起として、二面の量子数で特徴付けられるエッジモードを持ち、このエッジモードの解離に伴うトポロジカル相転移を示す。空間次元2次元で連続対称性を持った系なので、Mermin-Wagnerの定理により有限温度ではスピンの long-range order は無い。しかしながら、ここに面内の相互作用が存在すると系の次元は3になり、低温では通常の長距離秩序の出現が予想される。そこでこの場合の相転移がどのような性質のものかが問題になる。

三角格子上の古典ハイゼンベルグ反強磁性体の基底状態は所謂 120°構造になる。面内の相互作用がある場合にも、それがフェロ的であり、antiフェロ的であり、面内にはフラストレーションを生じないの3事柄は同じである。ここで各スピンの向きが互いに傾いている事が本質的に重要であり、スピン配列が collinear な反強磁性体やフラストレートしていない反強磁性体と決定的に異なる。この秩序の対称性を表現するには、通常使われるスピンの成分数だけでは不十分であり、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3次元空間（real space とは何の関係もない）の中の座標系と同じ自由度を持つ $V=SO(3)=P_3$ (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グモデルでは $V=S_2$ (S_2 : 球面) となる。（一般にフラストレートして

図1



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 $SO(3)=P_3$ という空間は 球面と異なり単連結でないという点が恐らく本質的に重要である。(渦の存在はこの空間が単連結でない事の直接の反映である。)

一般に系の相転移は空間の次元とオーダーの対称性によって決定されるというのがユニバーサリティの考え方であり 我々の系が今迄の系とは異なった対称性 ($V=SO(3)$) を持つ以上 新しい臨界現象の出現が十分期待できる。以下で モンテカルロシミュレーション²⁾ 及び繰り込み群³⁾ の応用³⁾ による解析の結果を報告する。

系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle}^{\text{面内}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J' \sum_{\langle i,j \rangle}^{\text{面外}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad J > 0 \quad (1)$$

$$\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z) \quad \text{with } |\vec{S}_i| = 1$$

シミュレーションの際には $J' = -J$ と置いた。相互作用は全て最近接。系のサイズは $N=L^3$ ($L=6, 9, 12, 15, 18, 24, 30$)、周期境界条件、ステップ数は最初の 2000 ~ 5000 MCS/spin を捨て 8000 ~ 10000 MCS で平均、各サイズ・温度で独立な run を 4 ~ 13 回行ない平均した。図 2 に比熱の結果を示す。 $T_c \approx 0.95J$ で強いサイズ依存性を持ったピークが観測され強い発散 ($\alpha > 0$) を示唆する。比較の為 図 3 に単純立方格子上の強磁性ハイゼンベルクモデルの比熱の計算結果を示す。こちらの場合ピーク値は L の大きい所でサテライト傾向があり高温展開が予想されているカスプ的挙動 ($\alpha < 0$) をユニバシスティブである。 T_c の値についても後者の場合には高温展開の結果と合う。

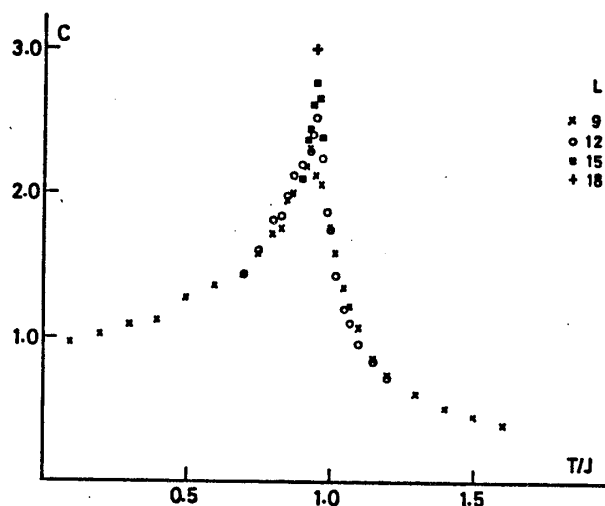


図2 比熱のサイズ、温度依存性

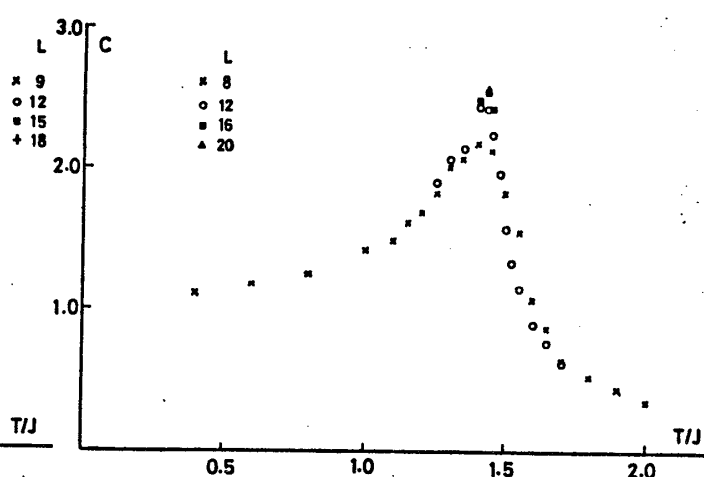


図3 単純立方格子上の強磁性的古典ハイゼンベルクモデルの比熱のサイズ、温度依存性。

図4に オーダーパラメーター(副格子磁化の root mean square)に関する結果を示す。4(a)は 温度・サイズ依存性、(b)では 有限系の結果を無限系に外挿した値と $T_c - T$ に対し両対数プロットした。このプロットから $\beta \sim 0.25$, $T_c \sim 0.95$ J と求まる。(c)は有限サイズスケーリング・プロットで $\beta \sim 0.25$, $T_c \sim 0.954$ J, $\nu \sim 0.53$ という値が得られた。図5は オーダー帯磁率に関する有限サイズスケーリング・プロットで $\gamma \sim 1.1$ と求まる。

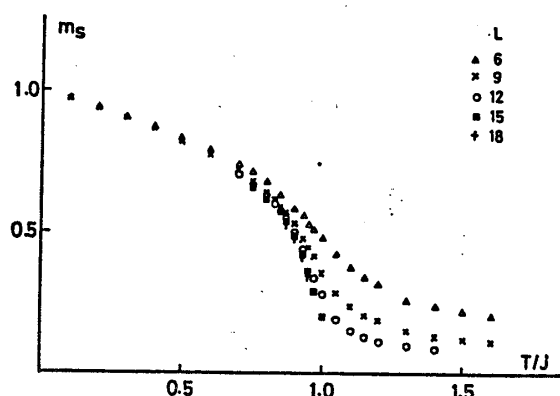


図4(a) オーダーパラメーター m_s (副格子磁化) のサイズ・温度依存性

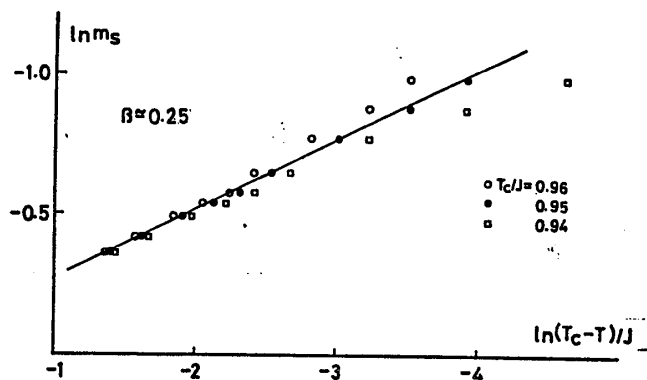


図4(b) オーダーパラメーターの熱力学極限への外挿値の両対数プロット

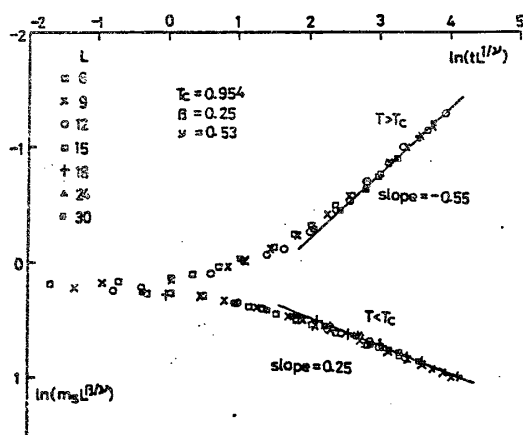


図4(c) オーダーパラメーターに関する有限サイズスケーリング・プロット。

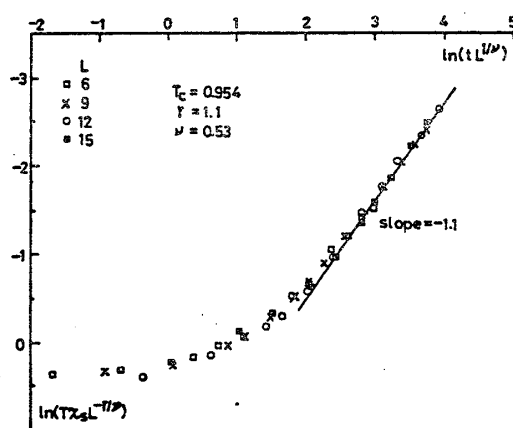


図5 オーダー帯磁率に関する有限サイズスケーリング・プロット。

まとめると臨界指数として $\beta \sim 0.25$, $\gamma \sim 1.1$, $\nu \sim 0.53$ が得られる。比熱に関しては所謂 regular part の寄与が大きい為 データからの直接の評価にはかなり中が残るが hyperscaling $\alpha = 2 - \nu d$ (d : 空間次元 $= 3$) を使うと $\alpha \sim 0.4$ と求まる。なお hyperscaling に関して1は もう一つ独立なチェックが行なえるが たとえば $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ を試してみるとうまく満たされて113事が判る。得られた臨界指数を表に12示す。今迄に知られて113標準のユニヴァーサリティクラスと比べ2 かなり異なった特徴的指数に

なっている事が判る。

	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】

またこの系が弱い一次転移を示す可能性についても検討を行なったが モンテカルロの結果からはその可能性は殆んど考えられない。即ち エネルギー・オーダーパラメーターの温度依存性に殆どなく ヒステリシスも観測されない。種々の初期状態からの緩和、エネルギーやオーダーパラメーターの分布、比熱のピークのサイズ依存性等も一次転移の徴候を全く示さない。以上の事から この系が新しいユニバーサリティクラスに属する二次転移を示すものと結論してよいと考える。(SO(3) ユニバーサリティクラス)

他方 この系の臨界指数が通常の場合と大きく異なっている為 適当な実験でこれらの値が観測出来る可能性がある。最も直接的な例は $S=3/2$ の層状三角格子ハイゼンベルク反強磁性体である VX_2 [$X=Cl, Br$] である。この系の三次元性は比較的弱い(10⁻²程度)低温相では三次元秩序が観測されている為 T_c に近づけば上記指数が観測されるものと期待される。この系については 平川、内脇らによって中性子散乱が竹田らによって比熱が⁷⁾測定されている。最近の臨界指数の実験的評価によると 中性子散乱により⁶⁾ $\beta \sim 0.20$ [0.25], $\gamma \sim 1.05$ [1.1], $\nu \sim 0.62$ [0.53] また比熱により⁷⁾ $\alpha \sim 0.4-0.6$ [0.4] が得られており理論値と割合良い一致が得られている。(〔 〕内が理論値)

ところで 上記の新しい臨界現象はフラストレート系に特有のものという訳ではない。本質的な点はオーダーパラメーターの特別な構造にあり この点から見るとヘリウム4のA相への超流動転移や キャント強(反強)磁性体の相転移も同じユニバーサリティクラスに属するものと予想される。^{3)He}については臨界領域が極めて狭いと予想されるので目下の実験精度で臨界指数を測定するのは困難の様である。キャントしたハイゼンベルク磁性体の一例として K_2FeF_6 がある。この系は三次元性が大変弱い(有限温度で三次元秩序を作る事が判る²⁾ あり 小山・松浦の測定によつて $\beta = 0.22 \pm 0.02$ が得られている。これは先の理論値に比較的近く 何らかの理由があるものと期待される。

二次相転移の最も成功した理論として K.G. Wilson による繰り込み群の理論が挙げられる。これには種々の手法があるが ユニバーサリティといった一般的性質を議論する際特に有効なのが ϵ 展開 ($\epsilon=4-d$) である。今のフラストレート系が ϵ 展開の枠内でどう

いう挙動を示すかは極めて興味深い問題である。筆者は d 次元の層状三角格子 (d 次元方向がフラストレートした三角格子で 残りの $d-2$ 次元方向については cubic な格子) 上の n 成分古典ハイゼンベルグ系について展開の解析を行なった。出発点のハミルトニアン (Ginzburg-Landau-Wilson ハミルトニアン) をどう取捨するかは問題であるが、ここでは元のハミルトニアンにスピンの weighting factor とは通常の ϕ^4 型と取って加えたものをフーリエ変換し 各副格子毎のモードのうち不安定な (k 点) の回りのもののみ取って以下の形を得た。

$$\mathcal{H}_{LW} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} \int d^d r \{ r(\vec{a}^2 + \vec{b}^2) + c[(\nabla \vec{a})^2 + (\nabla \vec{b})^2] \} \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2} \int d^d x \{ u(\vec{a}^2 + \vec{b}^2)^2 + v[(\vec{a} \cdot \vec{b})^2 - \vec{a}^2 \vec{b}^2] \}$$

ここに $\vec{a}(\vec{x})$, $\vec{b}(\vec{x})$ は各々 n 成分ベクトルである。 $v < 0$ なる $\vec{a} \parallel \pm \vec{b}$ の配置がエネルギー的に安定でありこれはフラストレーションが irrelevant な場合に対応している。もし $v > 0$ なる $\vec{a} \perp \vec{b}$ の配置が安定になり この場合 オーダーパラメーター空間が構造を持つ為フラストレーションが relevant な場合に対応する。また $v = 0$ なる これは n 成分のハイゼンベルグモデルに等価になってくる。この有効ハミルトニアンから通常の繰り込み操作により recursion、固定点を見つけた。ところでこの型は以前 Jones などが 3He に対して行なった計算と本質的に同じものである。これは 2つの系が同じ特性を持つ事を考えると当然予想された事であるが。

最低次 [O(4)] では 4ヶの固定点が見られる。1つはガウシアン ($u^* = v^* = 0$) で常に不安定、もう一つは n 成分ハイゼンベルグ ($v^* = 0$) でこの固定点は $n < 2$ でのみ安定である。残りの 2ヶの固定点は $n \geq n_1 = 12 + 4\sqrt{6} \sim 21.80$ or $n \leq n_2 = 12 - 4\sqrt{6} \sim 2.20$ の範囲でのみ存在する。フラストレーションが irrelevant な固定点 ($v^* < 0$) は以上の n の範囲の中さらに $2 < n < n_2 \sim 2.2$ でのみ安定、またフラストレーションが relevant な固定点 ($v^* > 0$) は $n > n_1 \sim 21.8$ でのみ安定である。後者の固定点については n の値は特定の n 成分ハイゼンベルグの n より小さくなり シミュレーションで得られた傾向に合っている様に見えるが、 $n = 3$ ではこの固定点そのものが消えてしまう。(数学的に言うと固定点を与える方程式が二次方程式になりこれが虚根を持つ。) さらにオーダーを上げると [O(6)], 多くの固定点新たに現れるが そのうち安定になり得るのは上記のもののみである。解析的計算は困難の為 recursion eqs. を数値的に解いて解析した。 ϵ -1 面で安定な固定点の存在範囲を図6に示す。 $\epsilon \rightarrow 0$ では先に述べた O(4) の結果に一致する。特筆すべき事は 有限の ϵ ではフラストレーションが relevant な固定点の安定領域が広がる事である ($\epsilon \rightarrow 0$ では $n > 21.8$ でのみ安定であったが $\epsilon = 1/2$ では $n \geq 6$ で安定)。しかしなお $n = 3$ ではこの固定点は消えてしまう (不安定になるのではなく存在しなくなる)。通常 安定な固定点の非存在は一次転移を表わすものとして解釈される事

が多いが、今の場合モンテカルロのデータはハッヨリ二次転移を示しており、又同様の構造を持つ ^3He の超流動相転移も実験的に二次転移が観測されており、一次転移として解釈するには無理がある。むしろ $\varepsilon \rightarrow 0$ での漸近展開としての ε 展開が上記の様な異常な振舞いをする場合にはその結果を余り文字通り受け取るのは危険であろう。

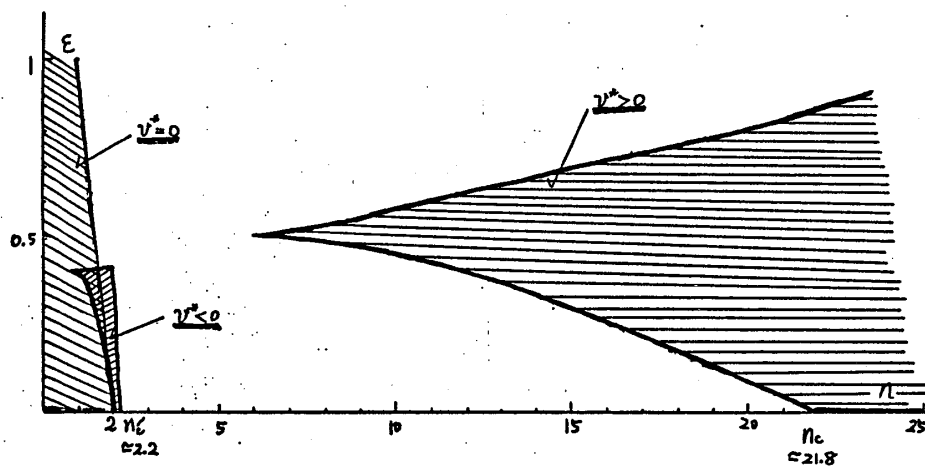


図6 ε - η 面での安定な固定点 ($O(\varepsilon^2)$) の存在領域

にもかかりず” ε 展開の計算は我々の系が通常のフェロの系とは全く異なったユニヴァーサリティクラスに属している事は明確にしてされる。又 η が大きい所で観測された $v^* > 0$ の固定点がシミュレーションで観測された臨界現象に何らかの形で対応している可能性がある。しかしながら通常の繰り込み群の手法の中でこの系の相転移がどう扱われるのか (あるいは場合によっては果たして扱えないのか) は将来の問題であろう。

文献

- 1) H. Kawamura & S. Miyashita: J. Phys. Soc. Japan 53 ('84) L9, 4138.
- 2) H. Kawamura: J. Phys. Soc. Japan 54 ('85) L3220. & 投稿準備中.
- 3) H. Kawamura: '85 物理学会分科会 千葉大 & 投稿準備中.
- 4) K. Hirakawa, H. Kadowaki & K. Ubukoshi: J. Phys. Soc. Japan 52 ('83) 1814;
H. Kadowaki, K. Ubukoshi & K. Hirakawa: J. Phys. Soc. Japan 54 ('85) 363.
- 5) K. Takeda, K. Ubukoshi, T. Haseda & K. Hirakawa: J. Phys. Soc. Japan 53 ('84) 1480.
- 6) H. Kadowaki: 私信.
- 7) K. Takeda: '85 物理学会分科会 千葉大.
- 8) K. Koyama & M. Matsuura: preprint.
- 9) D. R. T. Jones, A. Love & M. A. Moore: J. Phys. C 9 ('76) 743; D. Bailin, A. Love & M. A. Moore: J. Phys. C 10 ('77) 1159.