

ボンド希釈によるスピンギャップ-グリフィス-反強磁性相間の量子転移

物質・材料研究機構 (NIMS) 計算材料科学研究センター 安田 千寿¹
 東京大学大学院 工学系研究科 藤堂 眞治²
 東京大学 物性研究所 高山 一³

ボンド交替鎖を鎖間相互作用でつなげた二次元量子反強磁性ハイゼンベルグ模型で表される系におけるボンド希釈の効果を、量子モンテカルロシミュレーションより詳細に調べた。スピンギャップをもつ非磁性な状態にある系をボンド希釈すると、希釈ボンド端に対で誘起した磁気モーメント間の相互作用、異なる希釈ボンド端に誘起した磁気モーメント間の相互作用の二つの有効相互作用が競合することにより、ある有限の臨界濃度で反強磁性長距離秩序をもつ状態へ量子相転移することが分かった。また、無秩序相においては、量子グリフィス相の存在を示唆する結果が得られた。

1 はじめに

二次元量子スピン系にランダムネスを加えると、その強い量子揺らぎのために新奇的な量子相転移が存在することが新しいアルゴリズム [1, 2] の開発にともなう大規模な数値シミュレーションより明らかとなってきた。ここでは、特に、ボンド交替鎖を鎖間相互作用で二次元的につなげた正方格子上のスピン $1/2$ 量子反強磁性ハイゼンベルグ模型におけるボンド希釈の効果について報告する。ランダムネスが加わる前のこの模型の基底状態は、ボンド交替の強さと鎖間相互作用の強さに依存してスピンギャップ状態か反強磁性状態を示す [3]。このスピンギャップ状態にある系へのサイト希釈の効果はループアルゴリズムの量子モンテカルロ法 [1] により研究されており [4]、以下のようなことが分かっている。スピンをランダムに抜くと、抜いたスピンと最も強く結合していたスピンのサイトのまわりに磁気モーメントが誘起する。この磁気モーメントのドメインは希釈する前の系の相関長（バルクの相関長）程度に広がっており、ここではその磁気モーメントのドメインを「有効スピン」と呼ぶ。この有効スピンは有限のハルデン鎖におけるハルデン状態において端に誘起される磁気モーメントと同様のものであり、間のスピンがシングレット対を組んで非磁性な状態にあっても鎖端の磁気モーメント間には強い相関が存在する。一方、二次元系の場合は二次元空間上にランダムに有効スピンが誘起するが、一次元ハルデン鎖の場合と同様にこれらの有効スピン間には強い長距離相関があることが実空間上での相関関数の分布に関する数値的研究 [4] から明らかとなっている。有効スピン間の有効相互作用については、一次元系

¹ E-mail: yasuda.chitoshi@nims.go.jp

² E-mail: wistaria@ap.t.u-tokyo.ac.jp

³ E-mail: takayama@issp.u-tokyo.ac.jp

(二本足梯子)における研究の結果 [5, 6] より、二次元系の場合にも

$$\tilde{J}_{mn} \propto (-1)^{|r_m - r_n|} \exp\left(-\frac{l}{\sqrt{\xi_p^x \xi_p^y}}\right) \quad (1)$$

となることが期待される。ここで、 $l = |r_m - r_n|$ は r_m と r_n にある有効スピン間の距離であり、 $\xi_p^{x,y}$ は x, y 方向のバルクの相関長である。シングレット対の敷き詰め理解できるスピギャップ状態にある系を少しでもサイト希釈すると、有効スピンが誘起する。そして、有効スピン間にシングレット対があったとしても、もとの格子のスタaggerドネスを保存した $\tilde{J}_{mn}$ の交換積分をもつ有効相互作用のため有効スピンは強く相関し、反強磁性の長距離秩序状態を形成するのである。

本論文では、上と同じ系であるスピン 1/2 の二次元量子反強磁性ハイゼンベルグ系のスピギャップ状態のボンド希釈の効果調べる。ボンド希釈はサイト希釈と比べて、希釈したボンド端に対で生じたスピがシングレットを再形成する可能性があり、サイト希釈系より豊富な物理的特徴を示すと期待される [7, 8]。

2 ボンド希釈系における二つの有効相互作用

$-1 - \alpha (> 0) - 1 - \alpha -$ のボンド交替鎖を $J' (> 0)$ の交換積分をもつ鎖間相互作用で二次元的につなげた

$$\begin{aligned} H = & \sum_{i,j} \epsilon_{(2i,j)(2i+1,j)} \mathbf{S}_{2i,j} \cdot \mathbf{S}_{2i+1,j} + \alpha \sum_{i,j} \epsilon_{(2i+1,j)(2i+2,j)} \mathbf{S}_{2i+1,j} \cdot \mathbf{S}_{2i+2,j} \\ & + J' \sum_{i,j} \epsilon_{(i,j)(i,j+1)} \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1}, \end{aligned} \quad (2)$$

のハミルトニアンで表されるボンド希釈量子反強磁性ハイゼンベルグ模型を、周期境界条件を課した $L \times L$ の正方格子の系において、連続虚時間ループアルゴリズムの量子モンテカルロ法 [1] を用いて調べる。ここで、 $\mathbf{S}_{i,j}$ はスピン 1/2 の量子スピン演算子であり、ボンド占有演算子 $\epsilon_{(i,j)(k,l)}$ は、 x をボンド希釈濃度として、 $1-x$ の確率で 1、 x の確率で 0 を取る演算子である。希釈していない時の相図は上述したようにスピギャップ相と反強磁性相に分かれるが、本研究では $\alpha = 0.5$ の系を集中して調べる。このとき、臨界値 $J'_c \simeq 0.55$ 以下で系はスピギャップ状態にある [3]。

絶対零度における相転移を調べるために、 $L = 64$ までの系で十分絶対零度とみなせる温度 $T = 10^{-3}$ までの計算を行った。また、ランダムネスに関する平均を $10 - 10^3$ のサンプルについて取り、それぞれのサンプルにおいて平衡のための $500 - 10^3$ モンテカルロステップの後、測定のために $10^3 - 10^4$ モンテカルロステップの計算を行った。

図 1 に $\alpha = J' = 0.5$ の系における絶対零度のスタaggerド磁化 M_s の希釈濃度依存性を、サイト希釈とボンド希釈の場合で比較して示す。サイト希釈の場合、1% でも希釈すると有限の M_s が誘起し、そのピークとなる濃度まで M_s は増加する。低濃度では局在した有効スピが磁化を形成するため、有効スピの増加とともに M_s も増加するのである。また、高濃度になると、有効スピ同士が重なりすべてのスピが磁化に寄与し始め、希釈する前の状態が反強磁性状態

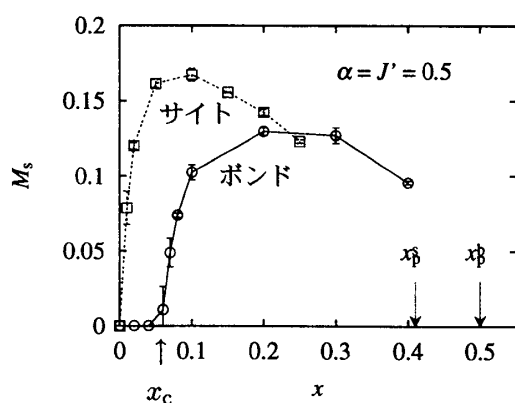


図 1: スタッガード磁化の希釈濃度依存性。 $x_c \approx 0.05$ は臨界濃度を、 x_p^s と x_p^b はそれぞれ正方格子におけるサイト過程とボンド過程のパーコレーションの閾値を表す。

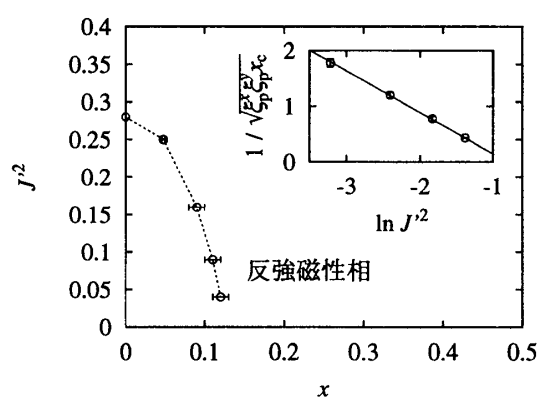


図 2: $\alpha = 0.5$ の系における $x - J'^2$ 空間内の基底状態相図。左下の領域には無秩序相が存在する。挿入図はバルクの相関長 $\xi_p^{x,y}$ を使って描かれている。

あった場合の希釈問題 [9] と同様に M_s はパーコレーションの閾値近くに向かって減少する。一方、ボンド希釈の場合、有限の臨界濃度 x_c まで M_s は誘起されない。

何故、ボンド希釈系では、有限の臨界濃度まで反強磁性長距離秩序が誘起されないのだろうか？
 $\alpha = 0.5$ の系において J' と x_c の関係を図 2 に示す。図中の臨界濃度の値は相関長に対する有限サイズスケリング解析より得た。これより、 $J'^2 - x$ 空間内に反強磁性相と無秩序相間の量子相転移ラインが存在することが分かる。相転移は、挿入図から分かるように、 J'^2 が $\exp(-c/\sqrt{\xi_p^x \xi_p^y} x_c)$ 、すなわち $\tilde{J}_{mn}$ と同等になるときに起る。ボンド希釈すると、希釈したボンド端に有効スピンの誘起し、二次元性を活かした $J' - 1 - J'$ の最短パスを通してその有効スピン間に反強磁性的な $\tilde{J}_{af} \approx J'^2$ の交換積分をもつ有効相互作用が生じる。そのため、シングレット対の再形成が起こり、有限の臨界濃度まで反強磁性長距離秩序が誘起されないのである。

図 3 に無秩序相内の $\alpha = 0.5$ 、 $J' = 0.3$ 、 $x = 0.08$ の系における局所場帯磁率

$$\chi_{\text{loc},i} \equiv \frac{\partial m_i}{\partial h_i} = \int_0^{1/T} d\tau \langle S_i^z(0) S_i^z(\tau) \rangle \quad (3)$$

の分布を示す。局所場帯磁率は局所磁化 m_i の局所磁場 h_i による微分で定義され、 $S_i^z(\tau)$ は虚時間 τ におけるスピン演算子の z 成分である。 $T = 0.001$ の十分低温で計算し、 $L = 48$ 、 64 の系においてすでにサイズ依存性は見られない。系が有限の相関長とギャップレスの低励起状態で特徴付けられる量子グリフィス相にある場合、 $\log(\chi_{\text{loc},i})$ の分布は $\chi_{\text{loc},i} \gg 1$ でべき的なふるまいを示す [10]。これより、図 3 は系が量子グリフィス相にあることを示唆している。この相においては、有効スピンの指数関数

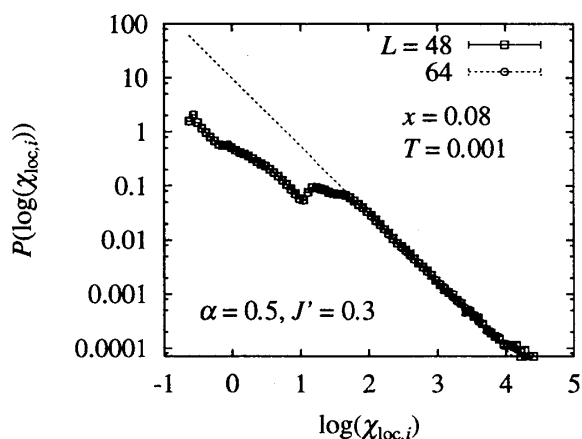


図 3: 局所場帯磁率の分布。破線は $\log(\chi_{\text{loc},i})$ の大きな領域におけるデータをフィッティングすることにより得られた。

的に小さな確率で極めて大きなクラスターを形成していると考えられる。

3 まとめ

$S = 1/2$ の二次元量子反強磁性ハイゼンベルグ系におけるスピンギャップ状態のボンド希釈の効果調べた。ボンド希釈系においては、サイト希釈系で誘起された有効交換積分 $\tilde{J}_{mn}$ に加えて、同じ希釈ボンド端に誘起した有効スピン間の有効交換積分 $\tilde{J}_{af}$ も生じ、それらが競合することによりスピンギャップ-量子グリフィス-反強磁性相間の量子相転移が起ることが分かった。無秩序相内でスピンギャップ相と量子グリフィス相がどのような関係にあるかは興味深い問題であり、今後、無秩序相内における系統的な研究を行う予定である。

謝辞

本研究の計算は東京大学物性研究所の共同利用スーパーコンピューターシステム超並列計算機 SGI 2800 で実行された。また、S.T. と K. Kato により開発された ‘Looper version 2’、S.T. により開発された ‘PARAPACK version 2’ のコードを使った。本研究は、日本学術振興会未来開拓事業 (JSPS-RFTF97P01103) の後援により行われた。

参考文献

- [1] H. G. Evertz, G. Lana, M. Marcu, Phys. Rev. Lett. **70** (1993), 875 ; B. B. Beard, U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **77** (1996), 5130 ; S. Todo and K. Kato, Phys. Rev. Lett. **87** (2001), 047203.
- [2] A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **59** (1999), R14157.
- [3] M. Matsumoto, C. Yasuda, S. Todo, H. Takayama, Phys. Rev. B **65** (2002), 014407.
- [4] C. Yasuda, S. Todo, M. Matsumoto, H. Takayama, Phys. Rev. B **64** (2001), 092405.
- [5] N. Nagaosa, A. Furusaki, M. Sigrist, H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996), 3724.
- [6] Y. Iino and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996), 3728.
- [7] C. Yasuda, S. Todo, M. Matsumoto, H. Takayama, J. Phys. Chem. Solids **63** (2002), 1607.
- [8] C. Yasuda, S. Todo, M. Matsumoto, H. Takayama, appear in Prog. Theor. Phys. Suppl.
- [9] K. Kato, S. Todo, K. Harada, N. Kawashima, S. Miyashita, H. Takayama, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 4204.
- [10] S. Todo, K. Kato, H. Takayama, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. A **69** (2000), 355.