

平成 21 年 6 月 3 日現在

研究種目：若手研究 (B)
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18740239
 研究課題名 (和文) 格子と結合した量子スピン系における乱れとフラストレーションの効果
 研究課題名 (英文) Effects of randomness and frustration on quantum spin systems with lattice distortion
 研究代表者
 安田 千寿 (YASUDA CHITOSHI)
 国立大学法人 琉球大学・理学部・准教授
 研究者番号：20398564

研究成果の概要：

スピン・パイエルス物質で観測されている「不純物誘起反強磁性長距離秩序」のメカニズムを調べた。量子力学的に非磁性な系をボンド希釈すると、ダイマーが壊れ、抜いたボンドの両端に有効スピンの誘起する。それらの有効スピン間には二種類の有効相互作用が競合して存在し、それらの相互作用の強さが同等になるまで反強磁性長距離秩序が誘起されないことを明らかにした。さらに、格子の自由度を考慮した系では、格子エネルギーの利得のため格子歪みの最適化がなされ、有効スピンの不純物近傍に誘起される場合と不純物間中央に誘起される場合があることを明らかにした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	600,000	0	600,000
2007 年度	500,000	0	500,000
2008 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	1,600,000	150,000	1,750,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：計算物理、磁性、物性理論、統計力学、物性基礎論

1. 研究開始当初の背景

スピンパイエルス物質 CuGeO_3 は低温で非磁性な状態にある。これは、磁性を担う Cu 原子のスピンが強い量子揺らぎのため格子歪みを伴ってダイマー-重項対を形成するためであり、スピンパイエルス転移と呼ばれ

ている。さらに、この物質の Ge を Si で置換すると、非磁性な状態から反強磁性長距離秩序のある状態へ相転移する。所謂、「不純物誘起反強磁性長距離秩序」である。Ge を Si で置換することは、Cu スピン間の相互作用を弱めることに相当している。不純物誘起長距離秩序は、格子変形と同時に形成された

スピンドイマーを不純物が壊すことにより不純物のまわりに有効スピンの誘起し、それらがまわりの一重項対を媒介にしてスタグガードな相関をもつことで理解される。しかし、この物質では、NMR と NQR の実験から有効スピンの不純物近傍には誘起されないことや、不純物濃度を増加させた時、格子歪みと反強磁性長距離秩序が共存した状態から一様な反強磁性長距離秩序状態へ相転移することが観測されており、これらの実験結果を理解するためには、格子の自由度と結合した系を解析しなければならない課題が残っていた。また、スピン・パイエルス物質 TiOBr において不整合なスピン・パイエルス状態から整合な状態への相転移が観測されており、当時は不純物誘起反強磁性秩序は観測されていなかった。この物質にはフラストレーションを生じさせるスピン間相互作用があることが知られており、不整合な状態の起源とフラストレーションとの関係、そしてその相転移機構には新奇な物理があると期待されている。

格子と結合した量子スピン系におけるスピン・パイエルス転移の研究は、鎖間相互作用を平均場近似で扱った位相ハミルトニアンの方法でなされており、スピン・パイエルス状態の実現には、強い量子ゆらぎにより系が臨界的な状態にあることが重要であることが示され、スピン・パイエルス状態と反強磁性長距離秩序状態の競合について調べられていた。同様な方法を用いて、不純物サイトで格子の歪みが抑制されると仮定した不純物効果が研究されており、反強磁性長距離秩序状態が誘起されることが示されていた。一次元系に限られるが、格子と結合したスピン $1/2$ 反強磁性量子ハイゼンベルク模型の数値的研究が、量子モンテカルロ法でなされ、端の状態に依存した有効スピンの局在・非局在性が議論されている。このとき、格子の状態更新には局所的更新の方法が用いられたが、「臨界減速」の問題のため極めて大規模な計算が必要とされた。また、格子変形を固定させたボンド交替量子スピン鎖やスピン梯子系で不純物効果の研究がなされ、有効スピンの概念が提案されている。ボンド交替系であるが、鎖間相互作用を正確に取り入れた二次元系の研究として、量子モンテカルロ法を用いた我々の以前の研究があり、二次元系でも有効スピン間にスタグガードネスが保たれた相関があり、その結果として反強磁性長距離秩序が実際に誘起されることや、サイト希釈とボンド希釈の効果の違いが明らか

にされていた。

2. 研究の目的

上記の実験結果（有効スピンの不純物近傍には誘起されないことや、不純物濃度を増加させた時、格子歪みと反強磁性長距離秩序が共存した状態から一様な反強磁性長距離秩序状態へ相転移すること）を鎖間相互作用の効果を含めて統一的に理解するためには、格子変形や不純物近くの状態を仮定したり、鎖間のスピン間相互作用を平均場的に扱ったりすることなく解析する必要がある。なぜなら、自発的に格子がどのように変形するのか、不純物により誘起した有効スピンの局在または非局在するのか、といった問題を解決することが上記の実験結果の理解につながるからである。

本研究では、格子の自由度と鎖間相互作用を正面から考慮した量子スピン系を量子モンテカルロ法を用いて解析することにより、上記の実験結果を理解することに加え、相転移の臨界現象やその微視的描像を総合的に理解する。

3. 研究の方法

本研究では、連続虚時間ループアルゴリズムの量子モンテカルロ法を用いた数値的手法で研究を行う。この方法は、従来の計算アルゴリズムにおいて問題であった「臨界減速」の問題をほぼ完全に解決し、従来に比べてより大きな系のより低温や臨界点近傍における物理量を精密に測定することが可能である。一方、本研究では、二次元の不純物系において不純物配置に関する多くのサンプルが必要であるため、依然として膨大な CPU リソースが必要とされる。そのため、並列計算は必要不可欠であり、MPI による並列化プログラムを開発して用いた。

4. 研究成果

本研究は次の2つに分けられる。

(1) スピン・パイエルス物質の模型として、格子の自由度をボンド交替として考慮した交替鎖からなる正方格子反強磁性ハイゼンベルク模型を用いたボンド希釈効果の研究

(2) 格子の自由度を考慮した交替鎖からなる正方格子反強磁性ハイゼンベルク模型

の基底状態とその希釈効果の研究

(1) ボンド交替鎖からなる正方格子反強磁性ハイゼンベルク模型のボンド希釈効果を量子モンテカルロシミュレーションによる計算物理学的手法により調べた。この模型の基底状態はスピンドイマー状態と反強磁性長距離秩序状態をとる。ボンド交替が大きく、鎖間相互作用の大きさが小さい領域でダイマー状態が実現している。ダイマー状態にある系をボンド希釈すると、ダイマーが壊れ、抜いたボンドの両端に有効スピンと呼ばれる磁気モーメントが誘起する。これらが一重項対を媒介にして相互作用することにより、長距離秩序が誘起されるのである。本研究では、それらの有効スピン間には二種類の有効相互作用が競合して存在し、それらの相互作用の強さが同等になるまで反強磁性長距離秩序が誘起されないことを明らかにした。有効相互作用の一つは、異なる希釈ボンドの両端に誘起した有効スピン間の相互作用であり、もう一つは同じ希釈ボンドの両端の有効スピン間の相互作用である。後者が一重項対の再形成をすることが重要である。従来、この問題は平均場近似などの近似的手法で扱われてきたため、このような理解には至っていなかった。この結果は、数値的手法を用いて二次元性や乱雑さを正面から取り入れたからこそ得られた結果である。

この研究に関する今後の展望としては、次の2つがある。

① 量子グリフィス相の存在

我々の研究で、ボンド希釈の場合、ある程度希釈しないと長距離秩序が誘起されないことが分かったが、ダイマー状態からこの長距離秩序状態に直接相転移するかどうかは確定していない。我々の研究では、それら2つの状態の間に量子グリフィス相というランダム量子系特有の状態が存在していることを示唆する結果を得ている。今後、量子グリフィス相がどのような機構で存在するかを明らかにしたい。

② 磁場誘起反強磁性長距離秩序相と不純物誘起反強磁性秩序相の関係

スピン・パイエルス物質 $TlCuCl_3$ は不純物によって反強磁性長距離秩序が誘起されるだけでなく、磁場を印可することによっても反強磁性長距離秩序が誘起する。これら2つの長距離秩序が同時に起こりえる状況において、それらがどのように相互作用し、共

存・競合するかは明らかでない。今後、不純物と磁場の効果を統一的に理解していきたい。

(2) スピン・パイエルス物質 $CuGeO_3$ で観測されている不純物誘起反強磁性秩序に関して、不純物置換により誘起される有効スピンの位置や格子歪みのパターンを理解するためには、格子の自由度と結合した量子スピン系を解析する必要がある。本研究では、まず最初に、格子の自由度をボンド交替として考慮した模型における基底状態のエネルギー比較を行い、様々な状態の安定性を検討した。つまり、スピン・パイエルス物質をよく記述するスピン $1/2$ のボンド交替鎖からなる正方格子反強磁性ハイゼンベルク模型のサイト希釈効果を量子モンテカルロシミュレーションを用いて調べ、格子歪みがなく一様な反強磁性秩序がある状態 (uniform AF 状態) と格子歪みも反強磁性秩序もある状態 (dimerized AF 状態) の基底状態エネルギーを比較した。この模型では、有効スピンは不純物近傍に誘起することが我々の以前の研究で分かっている。結果として、不純物濃度が小さい領域における dimerized AF 状態が、ある有限の不純物濃度で uniform AF 状態に相転移することが分かった。

本研究では、さらに、反強磁性ハイゼンベルグ鎖を二次元的に結合した模型において、格子の自由度を鎖内で古典的に考慮し、サイト希釈により基底状態や格子歪みのパターンがどのように変化するかを量子モンテカルロ法を用いて調べた。希釈されていない場合、鎖間相互作用が弱い領域で、格子が交互に歪んだ基底状態が実現する。これは、歪むと格子のエネルギーが増加するが、強い量子揺らぎのためにそれ以上にスピン系のエネルギーが減少するためである。この状態にある系をサイト希釈すると、次の2つの状態が実現することが分かった。つまり、希釈されていない時の歪み方を維持した状態 (A 状態) と、格子歪みのパターンの再形成が行われ、希釈サイト近くのスピン対が必ず強く結合する状態 (B 状態) である。A 状態は、格子エネルギーの効果が小さく、鎖間相互作用の強さが大きい領域で実現し、有効スピンは希釈サイトの隣に誘起される。一方、B 状態は、格子エネルギーの効果が大きく、鎖間相互作用の強さが小さい領域で実現し、有効スピンは希釈サイトの近くには誘起せず、希釈サイトの間に誘起している。 $CuGeO_3$ で観測された状態は B 状態に相当していることが分かる。さ

らに、希釈濃度を増加させると、B状態の領域が広がることが分かった。CuGeO₃より鎖間相互作用が強い物質の低希釈濃度領域で、A状態が実験的に観測されることが期待される。今後、実際の物質で鎖間相互作用の強さと希釈濃度を変化させることにより、誘起する有効スピンの位置をコントロールすることが可能になると期待している。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計3件)

(1) Chitoshi Yasuda, Yuma Uchihira, and Kenn Kubo, 'Six-Sublattice Structure of the Multiple-Spin Exchange Model on the Triangular Lattice in the Magnetic Field', Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 査読有り, 310 (2007) 1285-1287.

(2) Chitoshi Yasuda, Syngge Todo, and Hajime Takayama, 'Bond-Dilution-Induced Quantum Phase Transition in Heisenberg Antiferromagnets', Journal of the Physical Society of Japan, 査読有り, 75 (2006) 124704. 1-7.

(3) Chitoshi Yasuda, Daisuke Kinouchi, and Kenn Kubo, 'Spin-Wave Theory of the Multiple-Spin Exchange Model on a Triangular Lattice in a Magnetic Field', Journal of the Physical Society of Japan, 査読有り, 75 (2006) 104705. 1-8.

[学会発表] (計4件)

(1) 安田千寿「2次元スピンパイエルス系におけるサイト希釈効果」、日本物理学会第64回年次大会、2009年3月30日、立教学院

(2) 安田千寿「格子の自由度と結合した量子スピン系の解析」、日本物理学会2008年秋季大会、2008年9月23日、岩手大学

(3) 安田千寿「不純物誘起反強磁性秩序：ボンド希釈系における競合する二つの有効相互作用」、物性研短期研究会「量子スピン系の物理」、2006年11月29日、東京大学物性研究所

(4) Chitoshi Yasuda, 'Bond-Dilution-Induced Quantum Phase Transition in Heisenberg Antiferromagnets', ISSP International Workshop and Symposium on Computational Approaches to Quantum Critical Phenomena, August 9, 2006, Kashiwa, Japan.

[その他]

ホームページURL

<http://www.phys.u-ryukyu.ac.jp/~cyasuda>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

安田 千寿 (YASUDA CHITOSHI)
琉球大学・理学部・准教授
研究者番号：20398564

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者