

課題名 (タイトル) :

## 立方異方性のある量子磁性体のモンテカルロシミュレーション

利用者氏名 : ○加藤 康之

所属 : 創発物性科学研究センター・量子物性理論研究チーム

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

立方磁気異方性は、身近な磁性を示す結晶（鉄など）に結晶場の効果として現れるため、古くから研究されている[1]。結晶場の効果としては、他にも一軸異方性などが挙げられるが、立方対称性のある結晶中では立方異方性が主要な役割を果たす。単一イオン立方異方性のある量子ハイゼンベルク模型はこれまで平均場理論を用いて調べられてきた [2, 3]。特に  $S=2$  の場合、立方異方性が負（単純立方格子の結晶軸がスピンの容易軸になっている場合）で十分強い領域では、強磁性秩序が消滅し多極子秩序が現れると予想されている。また強磁性相への相転移の次数も変化すると予想されている。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では最近申請者が開発した量子モンテカルロ (QMC) 法の更新アルゴリズム、多不連続点アルゴリズム (MDA) [1] を、単純立方格子上の単一イオン立方異方性のある量子ハイゼンベルク模型に適用した。そして平均場理論による予想を検証するとともに、定量的に厳密な相図を得た。量子モンテカルロ法を用いる事により、多体の相互作用を正確に取込むことが可能であり、本模型のような多体問題の模型であっても、統計誤差の範囲内で厳密な計算結果が得られる。ループアルゴリズム、ワームアルゴリズム、向き付きループアルゴリズム、Stochastic series expansion 等は、効率の良い量子モンテカルロ法の大域的更新アルゴリズムであり、信頼され広く適用されている。（レビュー論文[5]を参照）しかしながら、これらの方法では単一イオンの立方異方性を取り扱う事が原理的に困難である。そのため本研究で取り扱う模型は大変基礎的な模型であるにもかかわらず、これまで量子モンテカルロ法が適用されてこなかった。多不連続点アルゴリズムを用い

る事により原理的には本模型を取り扱い可能になった。

## 3. 結果

$S=2$  の場合の相図を得た。平均場理論が予想する通り異方性により強磁性相への転移温度が下がる事が確認された。また異方性が正の場合には強磁性相転移は連続転移であるのに対して、負の場合は 1 次転移の存在が確認された。さらに異方性が負で強い場合には強磁性相が不安定になる事が確認された。ただし、異方性が負で強く、完全に強磁性相が消失していると考えられる領域では、シミュレーションの効率が著しく低下していることがわかり、多極子秩序の存在を確かめるには至らなかった。

## 4. まとめ

$S=2$  の単純立方格子上の単一イオン立方異方性のある強磁性量子ハイゼンベルク模型に MDA を適用した。その結果、厳密な有限温度相図を得る事に成功した。

## 5. 今後の計画・展望

今後、一般の  $S$  に対して基底状態相図（異方性の強さ vs. 磁場）について系統的に調べる予定である。

[1] K. Honda and S. Kaya, Sci. Rep. Tohoku Imp. Univ. **15**, 721 (1926).

[2] Sznajd, J. Mag. Mag. Mat. **42**, 269 (1984).

[3] Mitsek, Guslienko and Pavlovskii, Phys. Stat. Sol. (b) **135**, 173(1986).

[4] Y. Kato, Phys. Rev. E **87**, 013310 (2013).

[5] N. Kawashima, K. Harada, J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 1379 (2004).

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

**【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】**

- Yasuyuki Kato, Daisuke Yamamoto, Ippei Danshita,  
Quantum tricriticality at the superfluid-insulator transition of binary Bose mixtures,  
Physical Review Letters **112**, 055301 (2014).

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

- 加藤康之,  
立方磁気異方性のある量子磁性体の磁気秩序の消失,  
第 3 回 強相関電子系理論の最前線 (和歌山, Dec. 2013).

**【その他】**

- (ポスター発表) Yasuyuki Kato,  
Multidiscontinuity algorithm for world-line Monte Carlo simulations,  
Emergent Quantum Phases in Condensed Matter –from topological to first principle approaches (June 2013).
- (ポスター発表) Yasuyuki Kato,  
Multidiscontinuity algorithm for world-line Monte Carlo simulations,  
Strongly Correlated Electron Systems 2013 (June 2013).
- (ポスター発表) 加藤康之,  
多不連続点モンテカルロ法, (28aPS-11)  
日本物理学会 秋季大会(Sep. 2013).