

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

本課題では立方磁気異方性のある量子磁性体の模型の量子モンテカルロ (QMC) シミュレーションを行う。多不連続点アルゴリズム (MDA) [1] は、申請者が公表した QMC 法のためのアルゴリズムであり、高次の磁気異方性のある量子磁性体の模型への解析を可能にする。QMC 法は、統計誤差の範囲で数値的に厳密な解を与えるため、信頼され広く適用されている。本課題で取り上げる基礎的な模型の QMC シミュレーションは、エルゴード性の確保が難しく従来の方法では困難であった。そのため、負符号問題が無いにもかかわらず、これまで厳密な数値計算は行われてこなかった。

本課題で注目する立方磁気異方性は、鉄、ニッケルなどの身近な磁性体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 [2]。 $S=2$  の場合、平均場理論 [3] および QMC [4] 法の適用の結果、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、強磁性秩序が消滅する事がわかっている。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度、多不連続点アルゴリズム (MDA) を一般の  $S$  の場合に適用可能になるようにソースコードの開発を行い、小規模な系のシミュレーションを実装した。

## 3. 結果

$S=5/2, 3$  の場合に注目し、MDA を用いた QMC シミュレーションと厳密対角化法を比較したその結果、基本的には QMC の結果は統計誤差の範囲内で、厳密対角化法で得られた厳密な計算値と一致し、作成した MDA のソースコードの妥当性が確認された。ただし小規模な系であっても異方性の強い領域ではモンテカルロシミュレーシ

ョンの収束が悪くなることが確認された。

## 4. まとめ

一般の  $S>2$  に対して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への MDA を適用し、厳密対角化法で得られた数値厳密解との比較により作成したソースコードの妥当性を確認した。

## 5. 今後の計画・展望

今後、整備したソースコードを用いて、より大きなスピン ( $S=5/2, 3, \dots$ ) に対して有限温度相図の計算を行う。

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

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

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

[4] Y. Kato, N. Kawashima, in preparation.

平成 26 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】**

Kato Y., Onoda S.: “Numerical evidence of quantum melting of spin ice: quantum-classical crossover”, arXiv:1411.1918. Phys. Rev. Lett., submitted.

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

Kato Y.: “Quantum Monte-Carlo study of deconfined bosonic spinons, a Higgs-confining transition, and two crossovers in quantum spin ice”, New Horizon of Strongly Correlated Physics 2014, Chiba, Japan, June (2014).

Kato Y., Onoda S.: “量子スピンアイス模型の量子モンテカルロシミュレーション：非閉じ込めスピノン，ヒッグス閉じ込め転移，2つのクロスオーバー(9aBC-1)”，日本物理学会「秋季大会」，春日井市（愛知），9月（2014）.