

フラストレーションを含むスピン系の計算機実験

北海道大学理学部 高山 一

2次元正方格子上のイジングスピン系を考える。単位正方形を囲む4個の相互作用のうち1 (または3) 個が強磁性的で残りが反強磁性的であると、この4個の相互作用全てを得するようなスピン配列は存在しない。このような正方形 (相互作用の閉じたループ) はフラストレートしているという。2種の相互作用がランダムに配置された系では、フラストレートしている単位正方形とそうでない正方形もランダムに分布している。スピングラスの基本的な物性は、このようなランダムに分布したフラストレーションに起因するものと考えられている。一般にランダムネスは問題の解析を著しく複雑化する。そこでフラストレーション効果だけをまず理解するため、フラストレートしたループが規則的に配置された模型が提案され、その解析が進められたが、この類いのスピン系に対応する現実の磁性体が次々に見出され、スピングラスの問題とは別に、新しいタイプの相転移現象として注目されている (本報告集の目片氏の報告を参照されたい)。我々の研究グループでも当初はスピングラスの問題として標記の研究を始めたが、フラストレーションも規則的に含む系の一つの典型である2次元反強磁性三角イジング格子 (奇数個の反強磁性相互作用のつくるループはフラストレートしている) についての研究も現在並行して進めている。両者の磁性の異同を比較検討することによって、フラストレーション効果とランダムネス効果とに関するより深い理解を得たいと考えているが、現在はまだその段階に到っていない。以下では二つの問題について最近得られた結果を二節にわけて報告する。

I. 2次元ガウス型イジングスピングラスの動的振舞¹⁾

スピングラスの基本的な性質を記述する最も単純化された模型として、2次元正方格子上のイジングスピン系を考える。ガウス型とは、最近接スピン間のみに働くランダムな相互作用 J_{ij} がガウス分布 $P(J_{ij}) \propto \exp(-J_{ij}^2/2)$ に従う模型をさす (分布の σ がエネルギーと温度 ($k_B=1$) の尺度となる)。標記の動的振舞はイジングスピンの kinematic な時間変化、具体的にはモンテカルロ (MC) 法によるシミュレーションで観測される時間変化のことである。MC法は次のような1スピンの確率的な反転過程からなる。周囲のスピン配列が与えられたもとで、着目する中心のスピンを反転させるのに必要なエネルギー E を計算し、① $E \leq 0$ であればこのスピンを反転させ、 $E > 0$ ならば $\exp(-E/T)$ の確率で反転させる (Metropolis法)、または、② 全て αE について確率 $\{1 - \tanh(E/2T)\}/2$ で反転させる (kinematic Ising法)。系のすべてのスピンについて一通りこの操作を行

たとき、系は単位時間、1 MCS、を経過したと定める。
①または②の確率過程は、系がエルゴード的であれば、物理量の長時間平均がアンサンブル平均を与えることを保証する。

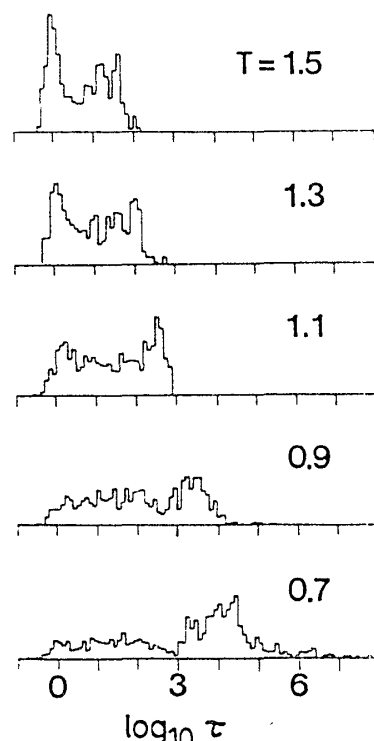
我々の興味は、上述のMC法によるシミュレーションを用いて、スピングラス系におけるスピンの緩和過程を解析することである。このため各温度における個々のスピンの自己相関関数 $\langle \sigma_i(0) \sigma_i(t) \rangle$ をシミュレーションで求め、そのデータが

$$\langle \sigma_i(0) \sigma_i(t) \rangle = (1-p_i) e^{-t/\tau_{i1}} + p_i e^{-t/\tau_{i2}} \quad (1)$$

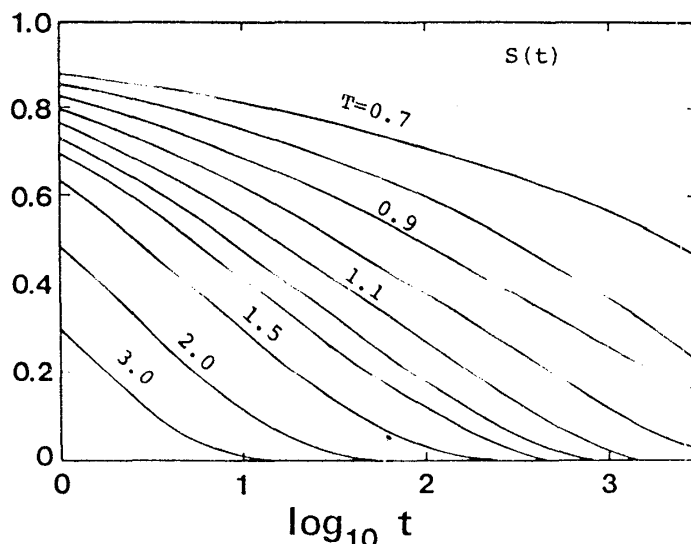
の関数形に合うように τ_{i1} , τ_{i2} , p_i を数値的に決定した。²⁾ ここで $\tau_i (\gg \tau_{i1})$ は i スピンが属するスピングラスの反転に伴う緩和時間であり、 τ_{i1} はクラスター内での i スピンの局所的な反転に伴う緩和時間と考えている。実際に観測される自己相関関数は(1)式よりさらに複雑で、それは系内のクラスターの動的振舞の複雑さを反映しているものと考えられるが、温度範囲 $T \geq 0.7$ で、ほぼ9割のスピン(系のサイズは 25×25)の相関関数は(1)式でフィットさせることができ、その緩和時間 τ_{i1} , τ_{i2} が決められた。こうして求めた $\log \tau$ の分布が1図に示してある(1つのスピンは2個の $\tau = \tau_{i1}$, τ_{i2} ももつとし、1図の分布はそれぞれの重み $(1-p_i)$ と p_i を乗じたものとして教えた)。

このような τ に対して、上述の確率過程①と②とがどのような差異をもたらすかについて一言しておく。明らかに過程②の方が①よりもスピン反転の確率が小さく、従って②の方法で求めた τ の方が大きいと期待される。具体的なデータを解析すると、観測したすべての温度範囲で、得られた τ の大きさにも無関係に $\tau_{i2}/\tau_{i1} \cong 1.4 \sim 1.5$ が成立している。即ち、2つの確率過程の違いは、基準となる単位時間をスケールするだけでよいことになる。本報告の結果はすべて過程②を用いたものである。

1図を求めた際のスピン自己相関関数そのものを用いて計算したスピン緩和関数 $S(t) = N^{-1} \sum_i \langle \sigma_i(0) \sigma_i(t) \rangle$ が2図に示してある。高温側 $T \geq 2$ で $S(t)$ は指数関数型、低温側 $T \leq 0.9$



1図



2図

でべき乗の減衰, 中間温度領域で $\log t$ 型の減衰が出ており, これは絶縁体スピングラスで観測される緩和過程³⁾と定性的な良好一致を示す。3図は $\ln \tau$ の平均値の温度依存性を2通りの方法で示してある。

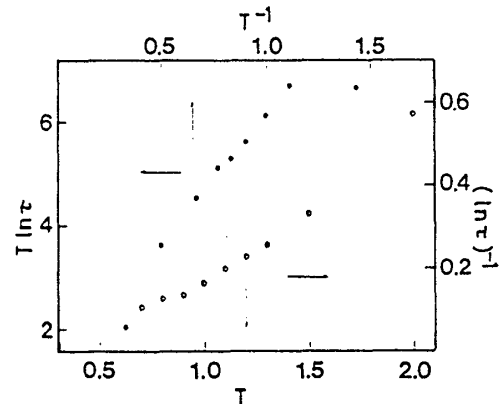
・点 は $T \ln \tau$ 対 T^{-1} のプロットで, 特性緩和時間が Arrhenius 則, $\tau = \tau_0 \exp(E/T)$, に従うとしたとき, 障壁エネルギー E が T に逆比例しているか否かをみるためである。最近 Young⁴⁾ は ±J 型イジングスピングラス ($P(J_{ij}) \propto \delta(J_{ij}-J) + \delta(J_{ij}+J)$) でこの逆比例関係が良く成立すると主張している。

一方, ○点 は $(\ln \tau)^{-1}$ 対 T のプロットで τ が Vogel-Fulcher 則, $\tau = \tau_0 \exp\{E/(T-T_0)\}$, に従うか否かをみるためである (ここでの E は T によらない定数)。我々は文献2)において ±J 型模型でこの経験則が成立すると主張した。Young の主張との違いは, どの温度領域の τ に基づいて解釈するかにあり, 低温側 (ガウス型の3図でいえば $T \lesssim 1.3$) でみる限り, どちらのフィットでも有意の差がない (より低温側のデータが解答を与えてくれる筈だが, 現在許される計算時間内では確かなデータは出し得ない)。(1)式で求める τ_{eff} を用いて系の動的帯磁率 $\chi(\omega)$ は近似的に

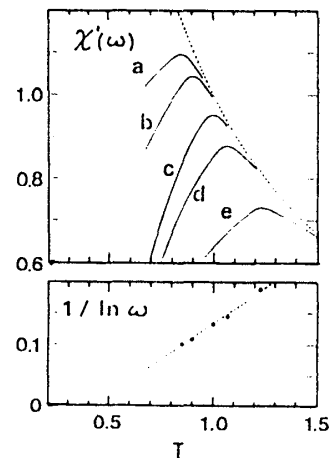
$$\chi(\omega) = \frac{1}{NT} \sum_i \left\{ \frac{1-p_i}{1-i\omega\tau_{i1}} + \frac{p_i}{1-i\omega\tau_{i2}} \right\} \quad (2)$$

で計算される。即ち, 各スピンは重み $1-p_i$ (p_i) で緩和時間 τ_{i1} (τ_{i2}) をもつ。キュリー-則に従うスピンとみなし, その緩和が系全体の $\chi(\omega)$ も与えるものと近似する。こうして計算された $\chi(\omega)$ の実部が4図上段に示してある。そのピークを与える温度と周波数の関係が4図下段で, これも明らかに Vogel-Fulcher 則を与え, 実験結果⁵⁾と定性的に良く一致している。5図に示した $\chi''(\omega)/\omega - \omega$ のプロット (a, b, c はそれぞれ $T = 0.8, 1.0, 1.2$ のデータ) も実験結果⁶⁾と定性的に良く再現している。

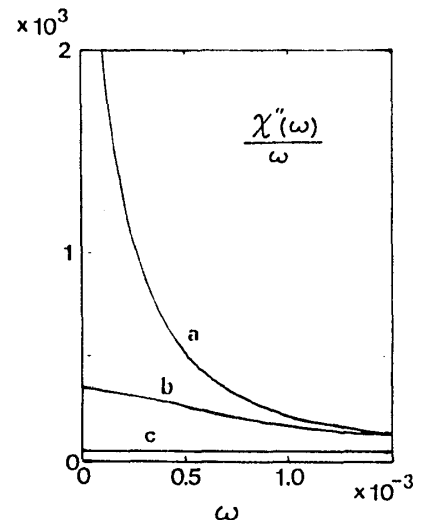
以上, 我々の単純化されたスピングラス模型に対するシミュレーションの結果は, 現実のスピングラスで観測される動的性質と定性的に良く一致するこゝを示した。Vogel-Fulcher 則に代表されるスピンの緩和過程は, 系のスピンの低下とともに順次スピングラスに取り込まれ, そのクラスターが他のクラスターとの相関からそのサイズが大きくなりながら順次凍結してい



3 図



4 図



5 図

くという描像で理解される。この凍結過程をより具体的に記述するには、1図に示される $\log$ での分布のモデル化が考えられる一つの方法である。実際、この分布を矩形分布で近似すると、2~5図の結果をほぼ再現できることが示されるが、詳細は文献1)を参照されたい。

II. 強磁性的次最近接相互作用をもつ反強磁性三角ラジング格子⁶⁾

反強磁性的最近接スピン相互作用 $J_1 (>0)$ と強磁性的次最近接相互作用 $-J_2 (<0)$ をもつ、2次元三角格子上のラジングスピン模型は、その分子場近似解が CsCoCl_3 や CsCoBr_3 で観測される逐次相転移を良く記述する⁷⁾ものとして最近注目されている。これらの磁性体は強く結合したスピン鎖が三角配列しているもので、純粹な2次元系とは言えない。以下に報告する我々の研究の主旨は、字義通り2次元スピン系としてみたときの相転移現象を解析することである。この系のハミルトニアンをフーリエ変換すると相互作用エネルギーは Brillouin ゾーンの K 点で最小値をとる (J_2 の値によらない)。従って常磁性 (P) 状態からの相転移は、まずこの波数に対応したスピン (密度波) の秩序相への転移と期待される。Alexander - Pincus⁸⁾はこの秩序相を記述する現象論的な Ginzburg - Landau 自由エネルギーを、系の満たすべき対称性を考察して導出し、その表式から標記の系は6回対称の異方性をもつ自由度2のXY模型に代表されるユニバーサルな組に属すると指摘した (フラストレーション効果がスピンの自由度を実質的に1上げている)。Mekata⁷⁾の提案した部分的な反強磁性 (pdAF: 3つの副格子磁化 M_i の期待値が $\langle M_1 \rangle = -\langle M_2 \rangle$, $\langle M_3 \rangle = 0$ を満たす) 相は、このGL自由エネルギーの分子場近似解に対応する。我々の計算機実験は、分子場近似解が不安定であることを、 $R \equiv J_2/J_1 > 0$ の系において有限温度でXY型の相転移 (P相 $\rightarrow$ Kosterlitz-Thouless-like 相) が生じていることを示している。より低温側では KT-like 相からフェリ磁性 (FR) 相への転移が起っているが、その転移温度 T_f は、最近接強磁性相互作用 $-J_2$ のみをもつ三角ラジング格子のキュリー-温度に良く一致している ($T_f = 3.64 J_2$)。

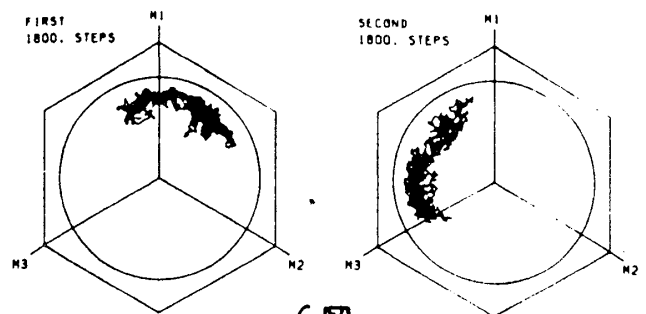
ここでのMC法は上述の反転過程①を用いている。熱平均値は7200 MCSの時間平均であり、この 10^3 MCS のオーダーでは、平均値の観測時間依存性は小さい点は確認した (但し、転移温度の近傍を除く)。KT型転移を有限系に関するシミュレーションで論ずるためには、オーダーパラメータに伴う帯磁率の系のサイズ依存性を解析しなければならない。⁹⁾この目的で、 90×90 , 60×60 , 45×45 , 30×30 の系を調べた。

注目する中間相での副格子磁化 M_i の時間変化をみるために、各MCS時間に出現するスピン配置を

$$M_R = M_1 - (M_2 + M_3)/2 \quad (3)$$

$$M_I = \sqrt{3}(M_3 - M_2)/2$$

の面に打ち出したのが6図である ($R = 0.1$ の $T = 1.0 J_1$ のデータで右図は始



6図

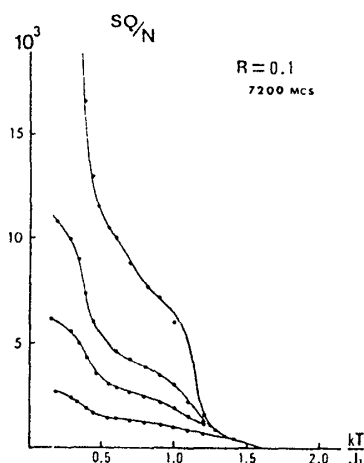
めの1800 MCS左図はそれに続く1800 MCSのスピンの配置)。(このプロットはスピン配置 (M_1, M_2, M_3) の $M_1 + M_2 + M_3 = 0$ の面への射影となっている。同時にこの M_R , M_E は上記のK点に対応するスピン秩序相を記述するオーダーパラメータの2成分となっている(元来のXY模型をいえば、スピンのX, Y成分の平均値 $N^{-1} \sum S_{x(y)i}$ に対応する)。6図から明らかなように、スピン配置はある一つのpdAF相に安定には存在しない。XY模型の見方をすれば、オーダーパラメータの振中は有限に生じているが、その位相が揺らいでいると言える。この位相の揺らぎに対応して、系は一つのpdAF相から他のpdAF相に転移しているわけで、我々が以前に提案した副格子磁化のスキューニング現象¹⁰⁾は、この系がXY模型であることに起因する基本的性質の一つと見なされる。

KT-like相を特徴づけるK点での磁気的構造因子 $\langle S(q) \rangle$ の温度、系のサイズ依存性を7図(4本の曲線は上から順に $90 \times 90, 60 \times 60, \dots$ のデータ)に示してある。この量と本質的に等価なく $\sum_{i=1}^3 M_i^2$ のサイズ依存性を

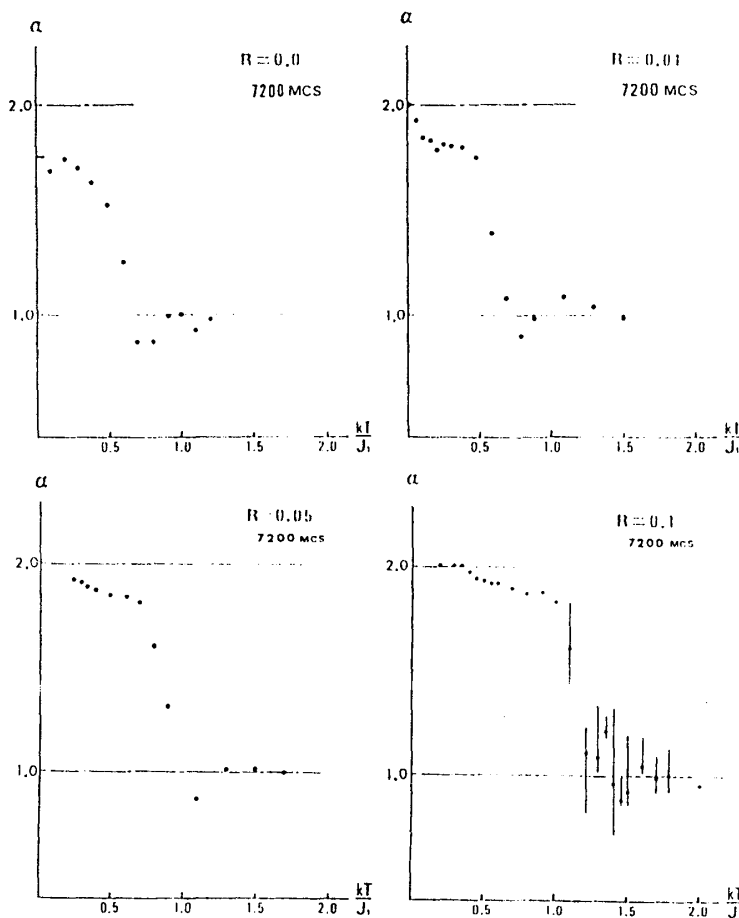
$$\langle \sum_{i=1}^3 M_i^2 \rangle \propto N^{\alpha-2} \quad (4)$$

と置いて、指数 α を種々の $R \equiv J_2/J_1$ の系で求めたのが8図である。7, 8図の振舞いは元来のXY模型で観測される⁹⁾ものと酷似しており、我々はメーT曲線の折れ目もKT型の転移点 T_c と見なした。 T_c での特異的な振舞いをさらにみるため、一般化されたStaggered帯磁率, $\langle \text{var}(\sum_{i=1}^3 M_i) \rangle$ や、 $\langle \text{var}(\sum_{i=1}^3 M_i^2) \rangle$ などをも解析したが、これらは同じ T_c で確かに発散的な振舞いを示す。こうして確認された T_c と、低温側のFR転移温度 T_f とを合せて、9図に示す相図が得られた。

(4)式に現われた指数 α は、オーダーパラメータの空間相関関数の指数 η と、 $\alpha = 2 - \eta/2$ の関係で結ばれる。ここで η は $\langle m(r) m(r') \rangle \propto r^{-\eta}$ で定義されるもの

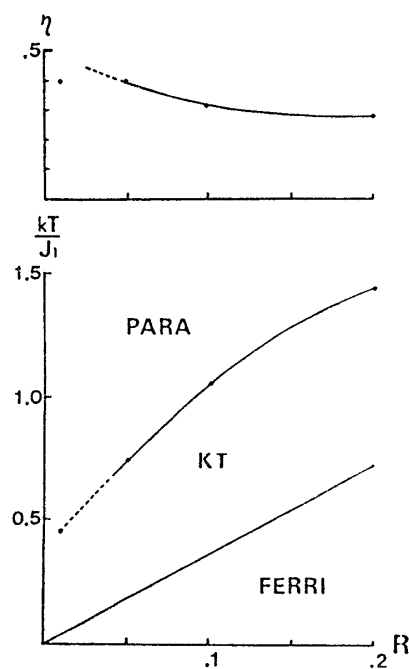


7図



8図

で、スピン $\vec{m}(r)$ はその2成分が(3)式の M_R, M_E に対応する局所的変数で与えられる。元来のXY模型では $\eta(T_c) = 1/4$ であり、 $R=0$ の純粋の反強磁性三角イジングスピン系では $\eta(0) = 1/2$ (但し、 $T>0$ で相関関数は指数関数型)¹¹⁾ である。9図に同時に示した $\eta(T)$ の値は R の増加とともに増大している傾向がみられる。但し、 R が小さい系のデータについては注意深い考察がさらに要求される。8図に示す $R=0$ のみは、 $T \leq 0.3J_1$ あたりで $\eta(0) = 1/2$ に対応する値に届いており、熱力学的極限($N \rightarrow \infty$)での厳密解¹¹⁾とは一致していない。これは我々の解析が有限系で行っているためである。 $R=0.01$ のみも $R=0$ のみの振舞いと似ているが、低温での飽和値が $\eta = 1/2$ に対応する値より大きいことからこの系では実際にKT型転移が起っているものと解釈している。詳細な議論は文献6)を参照されたい。



9 図

文献

- 1) K. Nemoto and H. Takayama, in preparation
- 2) K. Nemoto, H. Matsukawa and H. Takayama, J. Phys. Soc. Jpn 51 (1982) 3126.
- 3) F. Mezei, 3rd Intermag-MMM Conf. July 1982, Montreal.
- 4) A.P. Young, preprint.
- 5) Y. Miyako, S. Chikazawa, T. Saito and Y.G. Yuochunas, J. Appl. Phys. 52 (1981) 1779.
- 6) H. Takayama, K. Matsumoto, H. Kawahara and K. Wada, in preparation.
- 7) M. Mekata, J. Phys. Soc. Jpn. 42 (1977) 76.
- 8) S. Alexander and P. Pincus, J. Phys. A13 (1980) 263.
- 9) S. Miyashita, H. Nishimori, A. Kuroda and M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 60 (1978) 1669.
- 10) K. Wada, T. Tsukada and T. Ishikawa, J. Phys. Soc. Jpn. 51 (1982) 1331, K. Wada and T. Ishikawa, preprint.
- 11) J. Stephenson, J. Math. Phys. 11 (1970) 413.