

三角格子反強磁性体の Ising Kinetics

奈良女子大学 理学部

川崎和子 上江洲達也

[I] はじめに

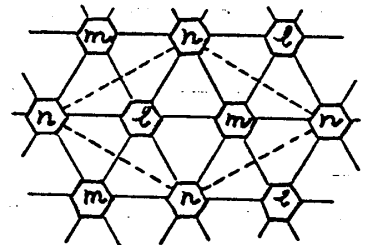
最隣接格子間には反強磁性的相互作用 $J_1 < 0$ があり、 α -隣接格子間には強磁性的相互作用 $J_2 > 0$ を持つ二次元三角格子磁性体は、1977年 Mekata⁽¹⁾の分子場理論により、その性質が明らかにされてから、フラストレーションを持つ系の問題として、多くの研究者の注目するものとなった。この系の特徴は磁気構造の対称性から来る縮退にある。その為に上記の二種類の相互作用の割合 $\alpha \equiv 2J_2/J_1$ の大、小及び温度 T に依存して、様々な相転移が生じ、ある特定の値では、部分的に無秩序相 (P.D.O) が現われる。

そこで、簡単の為に Ising Spin からなる二次元三角格子を考え Ising kinetics の方法を用いて分子場近似の範囲で、その動的な挙動について調べて行きたい。

[II] モデルと運動方程式

いま、二次元三角格子反強磁性体と α 図に示す三つの副格子 (l, m, n-格子) に分けて考える。図において破線で囲まれた部分は、磁気単位胞で、その位置を位置ベクトル $\mathbf{j}$ で表す。外部静磁場 H (z方向) の下での l-格子の Hamiltonian $\mathcal{H}_l$ は

$$\mathcal{H}_l = -6J_1(\langle S^m \rangle + \langle S^n \rangle) \sum_i S_i^l - 12J_2 \langle S^l \rangle \sum_i S_i^l - g\mu_B H \sum_i S_i^l$$



(α 図)

であり、但し S_j^l は site $\mathbf{j}$ にある l-格子の spin を表す。

次に、この model に対して Ising kinetics の方法を適用する。系全体 N 個の spin 配置 $(s_1, s_2, \dots, s_N) (\equiv \{s\})$ にある時の確率関数 $P(s_1, s_2, \dots, s_N, t)$ とすれば S_j^l の期待値は

$$\langle S_j^l \rangle = \sum_{\{s\}} S_j^l P(s_1, s_2, \dots, s_N, t) \quad (1)$$

と書かれ、その運動方程式は

$$\frac{1}{t} \frac{d}{dt} \langle S_j^l \rangle = -\langle S_j^l \rangle + \langle \tanh \beta E_j^l \rangle \quad (2)$$

とあり、但し E_j^l は S_j^l の受ける局所場であり、この式において分子場近似と行くと

$$\langle \tanh \beta E_j^l \rangle \cong \tanh \langle \beta E^l \rangle$$

$$\text{但し } \beta \langle E^i \rangle = \tilde{\beta} [\alpha \langle S^i \rangle + \langle S^m \rangle + \langle S^n \rangle + \gamma]$$

$$\text{臨界温度 } T_N = 6S^2(2J_2 - J_1)/k_B,$$

$$\tilde{\beta} \equiv \left[\frac{T}{T_N} (\alpha - 1) \right]^{-1} = 6S^2 \beta J_1, \quad \gamma = g\mu_B H / 6SJ_1$$

(2) 式の parameter τ を定数とし 時間スケールを $\tau t \rightarrow t$ と変換すれば、 $x \equiv \langle S^i \rangle$, $y \equiv \langle S^m \rangle$, $z \equiv \langle S^n \rangle$ の三つの副格子上の各々の磁化に対する運動方程式は、次式で表わされる。

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -x + \tanh[\tilde{\beta}(\alpha x + y + z + \gamma)] \\ \frac{dy}{dt} &= -y + \tanh[\tilde{\beta}(x + \alpha y + z + \gamma)] \\ \frac{dz}{dt} &= -z + \tanh[\tilde{\beta}(x + y + \alpha z + \gamma)] \end{aligned} \quad (3)$$

左辺の時間微分を零とすることは、平衡状態での磁化が求まるわけであるが、この三元連立非線型微分方程式においては複数の解が存在することが知られている。ここでは、次の二つの条件を満足する解を平衡状態における磁化を表わす物理的解とす。

(i) x, y, z で Gibbs の自由エネルギーを表わした時、その値を最小にすること。

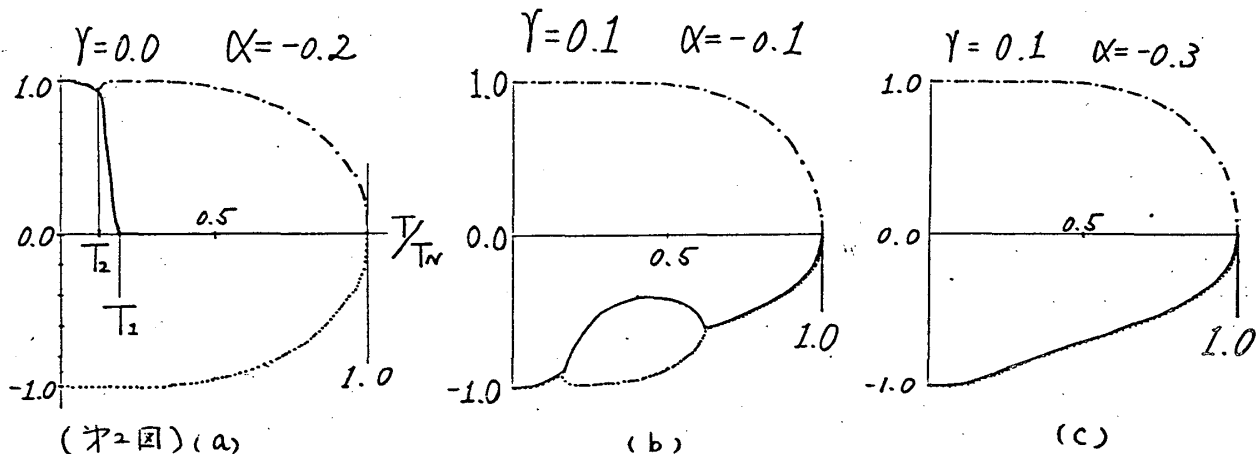
(ii) 解のまわりのゆらぎが安定であること。

【III】 結果

(i) 有限静磁場がかかっている時の平衡状態

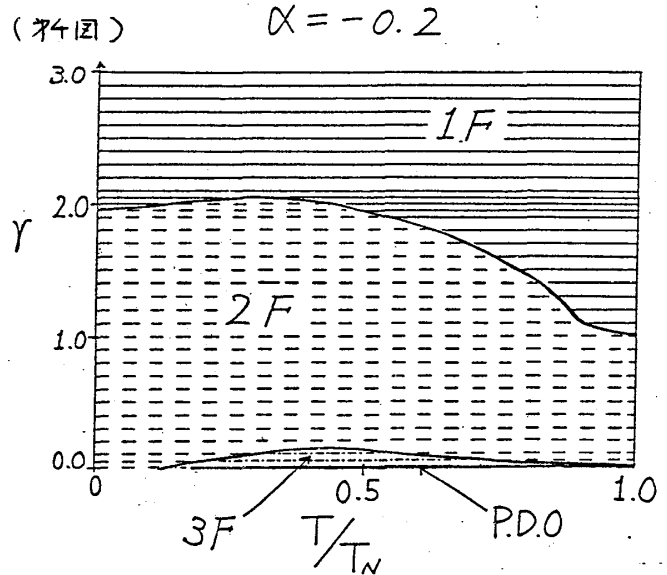
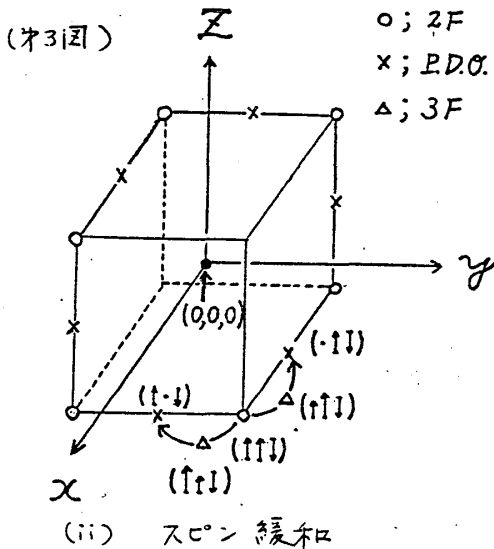
第2図に、いくつかの場合について、各副格子の磁化の温度変化を示した。

当然のことであるが $\gamma = 0$ の場合、Makata の結果と一致する。(第2図(a))。これを分岐理論で解釈すれば、第3図において、 $\alpha > -0.8$ では、温度 T を 0 から増加させた時 $T = T_2$ でビーク・フォーク分岐 (symmetry breaking) を起し、2F が不安定になり、安定な 3F が生じる。更に T_2 から温度を上げると 3F が P.D.O 状態と合体して P.D.O が安定化

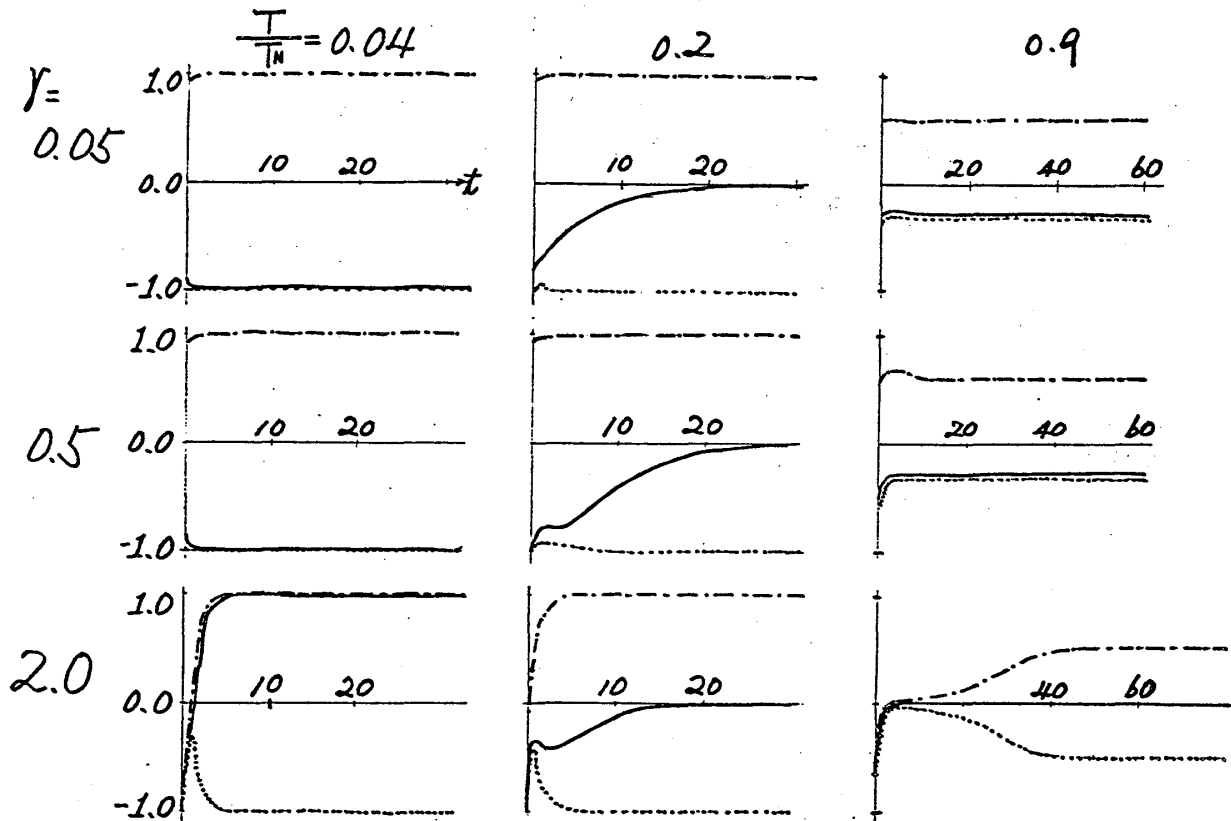


する。T₁以上では図の六面体の体積が小さくなって T=T_Nで 0 になる。つまり 2F と P.D.O が全体として安定な (0,0,0) 状態となる。

次に外部静磁場をかける。原点に因する反転対称性がなくなる為に縮退が解け、このとき P.D.O は 3F になる。典型的な事例を第2図(b), (c)に示す。(b)では、2F → 3F → 2F → disorder なる変化を示しているが、これは、2F 解のピッチフォーク分岐と、その逆過程を示している。(c)では、その分岐は生じない。第4図に $\alpha = -0.2$ の場合の γ -T 図を示す。



静磁場の下で平衡状態にある系に対して、その外部磁場を取り除いた後のスピンの振舞から、緩和の様子を知ることが出来る。



(第5図)

初期値として上で求めたある有限磁場下での平衡状態での値（厳密には、対称性を破る為に少しずらした値）を取り、磁化の時間発展を示す(3)式において $\gamma=0$ として解を調べる。 $\gamma=0.05, 0.5, 2.0$ の各々に対していくつかの温度での磁化の時間依存性を図5に示す。 $T/T_N < 0.9$ の低温側では、時間の経過に伴う変化の様子は、場合 場合によって異なるが、 $t \rightarrow \infty$ の平衡値での磁化は初期状態の如何に拘わらず、いずれも元々外場を零とした時の平衡値に到達する。しかし $T/T_N > 0.9$ では、図に示した時間範囲では、極く初期段階を除いて殆んど時間的に変化はみられない。緩和時間が極端に長くなるいわゆる critical slowing down の様子が伺われる。ここで特に注目したいのは、 $\gamma=2.0$ での平衡値を初期値とする磁化の時間的な変化である。他の場合の時間的な変化は比較的単調であるのに対してこの場合には、初期的段階で振動的な振舞がみられることである。これは系の対称性から議論すべきである。

[IV] おわりに

ここでは、三角格子反強磁性体の Ising kinetics に関して極く一部を述べたが frustration を持つ系の動的な性質の特徴を捉える為に更に任意の振動磁場の下での response を調べなければならぬ。また fluctuation の効果も正確にとらえるためには spin の相関を考慮しなければならない。それ等の結果については別の機会に述べ度い。最後に数値計算を熱心に遂行して下さい。四回生の加藤智子さん、武田麻里子さんに感謝致します。

References :

- (1) M. Mekata, J. Phys. Soc. Japan 42 (1977) 76
- (2) R. J. Glauber, J. Math. Phys. 4 (1963) 294
- (3) N. Matsudaira, Canad. J. Phys. 45 (1967) 2091
- (4) M. Suzuki and R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 24 (1968) 51

(注) 本文中 1F は $x=y=z \neq 0$, 2F は $x=y \neq z$
 3F は $x \neq y, x \neq z, z \neq y$ を各々意味している。