

- 21) Y. Y. Goldschmidt, Phys. Rev. **B30** (1984), 1632.
- 22) M. Oku, Prog. Theor. Phys. (1985), to be published.
- 23) M. Oku, Prog. Theor. Phys. (1985), in submission.

スピングラスの量子効果

大阪市大・理 石井広湖, 山本哲也

スピングラスの理論研究は, Ising スピン系や, それを m -成分に拡張した m -ベクトルモデルで主になされてきた。Sherrington-Kirkpatrick (SK) モデルでは, T_c 以下でスピン位相空間に正負の競合する相互作用に起因する沢山の準安定状態が存在する。そして高い障壁で隔てられた準安定状態の一つ一つが, 温度を下げると更に次々と細分化されてゆくというスピン空間の構造が, Mézard 等¹⁾の研究で最近明らかにされた。この準安定状態に系が落ちこんでスピングラス凍結が生ずる。ハミルトニアンの非対角項によるスピンの量子力学的運動は, この凍結にどのように逆うかを, レビューを交えて報告する。ここでは SK モデル

$$H = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_{iz} S_{jz},$$

J_{ij} を与える確率分布は,

$$p(J_{ij}) = \sqrt{N/2\pi\tilde{J}^2} \exp[-N J_{ij}^2 / 2\tilde{J}^2], \quad (1)$$

に限定し, § 1 では $S_{iz} \rightarrow \vec{S}_i$ とした時, 即 Ising 系から Heisenberg 系へ移った時導入される非対角項のもたらす量子効果を, § 2 では SK-Ising モデルに加えられた横磁場による量子効果を述べる。伝導電子など他の自由度による量子効果には触れない。

§ 1. SK-Heisenberg モデル

良く知られているように, 最近接スピン間にのみ強磁性相互作用の働く正方格子は, Ising モデルでは T_c が存在するが, Heisenberg モデルでは転移がない。立方格子ではどちらにも T_c が存在するが, 後者の T_c の方が前者より低い。スピングラスでも, Heisenberg モデルになるとスピングラス凍結は量子効果のため生じないのではないかと, という懸念が出されたが²⁾, T_c は低下するものの結局凍結が生ずることが結論された^{3), 4)}。ここでは Bray-Moore³⁾ のレプリカ

法による考察の概略を紹介する。

レプリカ法では、 $\rho(J_{ij})$ による平均を $\langle \rangle_J$ と記すと、

$$-\beta F = \langle \ln Z \rangle_J = \lim_{n \rightarrow 0} (\langle Z^n \rangle_J - 1) / n, \quad (2)$$

$$\langle Z^n \rangle_J = \langle \text{Tr} \exp(\beta \sum_{\alpha=1}^n \sum_{(ij)} J_{ij} \vec{S}_i^\alpha \cdot \vec{S}_j^\alpha) \rangle_J,$$

を計算する。 α はレプリカを表わす。 $\vec{\sigma}_i^\alpha$ の代りに σ_{iz}^α であれば

$$\langle Z^n \rangle_J = \text{Tr} \prod_{(ij)} \langle \exp(\beta J_{ij} \sum_{\alpha} S_{iz}^\alpha S_{jz}^\alpha) \rangle_J \quad (3)$$

と書け、 J 平均を行うことを可能とし、問題はランダム系から均一な 4 体相互作用の系に還元される。Heisenberg 系では演算子の非可換性のため、(3)へは直ぐには進めない。そこで虚時間の大小順に演算子を並べる操作 P 記号のもとでは、すべての演算子は可換となることに基づいて、

$$\langle Z^n \rangle_J = \text{Tr} P \prod_{(ij)} \langle \exp(J_{ij} \int_0^\beta \sum_{\alpha} \vec{S}_i^\alpha(\tau) \cdot \vec{S}_j^\alpha(\tau) d\tau) \rangle_J$$

とした。ここで $S(\tau) = \exp(\tau H_0) S \exp(-\tau H_0)$ で、 $H_0 \rightarrow 0$ として 2 時間順序をつけるためのみに H_0 を導入した。 J 平均で 4 体相互作用の問題に直した後、SK 理論のように Hubbard-Stratonovich 変換を行えば、レプリカ α 、時刻 τ のスピンの、同じく (α', τ') のスピンの相互作用する系の問題に転換される。 T_c 以下を論ずるには、レプリカ対称の破れに加えて、 τ 依存の問題があり複雑である。しかし高温から T を下げてゆくとき、不安定性が最初に発生するのは $\omega = 0$ のモードであるから、 T_c を決めるには τ 依存を無視でき、

$$1 = \tilde{\chi}_{\text{loc}}(T_c)$$

で T_c が決定される。パラ相の局所帯磁率 χ_{loc} の τ 依存性を無視した近似では、 $\chi_{\text{loc}}(T) \propto 1/T$ ($T \rightarrow 0$) となるので必ず有限な T_c が存在する。 $s = 1/2$ で得られた T_c は、Ising の時の $1/\sqrt{3}$ 倍である。条件(4)は Ising の時と同じで、 H の非対角項の役割はパラ相の帯磁率を押えて T_c を低下させることにある。

この非対角項の効果を AF 三角格子の場合⁵⁾ と比べると次のように解釈できよう。AF 三角格子では Heisenberg ハミルトニアンが、フラストレートしたローカルな二つの構造の間で行列要素を持つことで共鳴状態が形成され、次から次へと結晶全体を走ることが出来る。換言すれば、1 つのフラストレートしたスピン配位への凍結は量子効果で溶けてしまう。一方 SK スピ

ングラスでの沢山の準安定状態も競合する相互作用によるフラストレーションの結果であるが、準安定状態相互のスピンの空間での隔たりが大きくて、 H の非対角要素を有限回用いて辿りつける程近くはない。それで低温で結局凍結してしまう。

$T < T_c$ でスピングラス状態になると、量子効果は一つの準安定状態内でのスピンの揺らぎとして現れる。低温でこれはスピン波の形となることが期待されたが、Walker-Walstedt⁶⁾はRKKY相互作用で結合した系の計算機シミュレーションで実際にこれを示した。 $T = 0$ で1つのエネルギー極小状態で各スピンはランダムな方向にある。これを反強磁性体の N 副格子のNéel状態に対応させ、そこからのスピン波を求めた。最も顕著な量子効果は、このNéel状態からの零点振動であり、スピンの縮みは $s = 5/2$ で約6%、 $s = 1/2$ では30%にも達している。準安定状態は量子効果のため随分柔らかいことが分かる。しかしスピン波のエネルギーが中性子線の分解能より小さいため、又不均一性による、あるいはKorringa機構によるスピン波の減衰のため、中性子散乱からのスピン波の検出はなされていないようである。最近Alloul-Mendels⁷⁾はCuMn等のMnのNMRの共鳴周波数の温度変化を測定し、Mn電子スピンの縮みが T^2 で変化することを見出した。これは $\omega \propto q$ の分散関係を仮定したスピン波からの結論と合致する結果であるが、零点振動の寄与はRef.(6)の予想より小さく見付けられていない。一方スピン波が $\omega \propto q$ の分散関係をもてば、比熱 C_v は T^3 に比例し、ほぼ T に比例する実験の解釈には別の機構が必要となる。NMRと比熱の測定時間スケールの差、RKKY相互作用はSKモデルの相互作用に比べて短距離力であること等、難しい問題があるが、現実の系で $C_v \propto T$ を与える機構が本当に一つの準安定状態内の揺らぎで説明できるかどうか今後の問題であろう。

§ 2. SK-Ising'モデルに於ける横磁場

SK-Isingモデルの準安定状態への凍結が、横磁場 A で表わされるスピン反転の一体運動でどのようなになるか、次の系で考える。⁸⁾

$$H = - \sum_{(ij)} J_{ij} \sigma_{iz} \sigma_{jz} - A \sum_i \sigma_{ix}, \quad \sigma_{iz} = \pm 1. \quad (5)$$

J_{ij} は(1)で与えられる。 $s = 1/2$ の系ならば磁場の方向を量子化軸にとれるから、横磁場はありえない。しかし例えば、KCl中の OH^- は Cl^- の位置に置換されるが格子点近傍の6個の同等の平衡位置を有し、その間をトンネル運動することが知られている。各平衡位置には電気双極子が伴うので、双極子相互作用で OH^- は整列しようとする。従って(5)はこの系を2準位に簡単化したものを表わしているともみなせる。実際 $10^{19}/\text{cc}$ 程度の $\text{KCl} : \text{OH}^-$ はスピ

ングラスと類似した物性を示す。⁹⁾ この系を計算機シミュレーションで調べると、双極子相互作用が多数の準安定状態を作り出すことが分かる。¹⁰⁾

さて(5)の Δ 項を摂動としてパラ相で自由エネルギーを計算すると、 $O(1)$ の対数項は

$$-(1/4\beta) \ln [1 - (\beta \tilde{\tau})^2 + 8(\beta \Delta)^2 (\beta \tilde{J})^4 (I_2 - I_3) + O(\Delta^4)], \quad (6)$$

ただし

$$I_n \equiv \int_0^1 x^n \exp [-2(\beta \tilde{J})^2 x(1-x)] dx. \quad (7)$$

(7)の対数発散点より求めた T_c は

$$T_c = \tilde{J} [1 - 0.225 (\Delta/\tilde{J})^2 + O(\Delta^4)].$$

Δ のために転移温度が下げられてゆく。(7)に現れた指数関数は、或るスピンの反転した際他の $(N-1)$ 個のスピンの相互作用エネルギーの変化に起因し、長距離力で分布に分散を有すSKモデル(1)の特徴を反映している。この因子のため低温で I_n が減少するので、(6)の Δ^2 のスピンの反転の効果も効かなくなってくる。(6)とコンシステントのように(5)のTAP方程式を作り、 T_c を決定する条件を導くと、(4)と同じ形の $\tilde{J}_\chi(T_c) = 1$ を得る。パラ相の χ は、

$$\chi = \beta [1 - 2(\beta \Delta)^2 (I_1 - I_2) + O(\Delta^4)] \quad (8)$$

と求められるが、これはCurie則から Δ のため一旦下がるが、上述の積分 I_n の温度依存により低温で再びCurie則に接近する。 Δ^4 の次数は大分複雑だがこの傾向は変らない。これが Δ の高次でも成り立つと、 $\tilde{J}_\chi(T_c) = 1$ は Δ が大きいても有限な T_c を解として持つことになる。図1は(8)を使って得た T_c を表わす。

SKモデルでは Δ が大きくても結局スピン反転が効かなくなつて、スピングラス凍結する。一方(5)で $J_{ij} = J(>0)$ を最近接スピンに限った規則格子の系は、 $\Delta_c (\sim J)$ 以上の Δ では $T=0$ でもパラ相のままでいる。¹¹⁾ 長距離力でもフラストレーションのない $J_{ij} = J/N(>0)$ の系では、(7)の指数関数は現れずやはり有限な Δ_c が存在することが示せる。SKモデルでのこの特性は、深さの様々な沢山の準安定状態が高い障壁で互いに

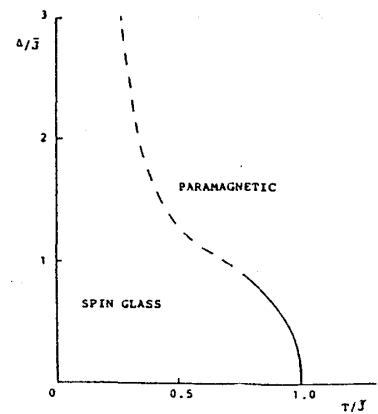


図 1

隔てられているため、どんな「飛び移り積分」 Δ をもってしてもスピン位相空間の小領域に局在してしまうためと解釈できる。この事を別の角度から見るため、(6)の Δ 項を非摂動項、 J_{ij} 項を摂動として基底状態のエネルギーを計算した。 $x = (\tilde{J}/4\Delta)^2$ として

$$E = -N\Delta(1 + 2x + 8x^2 + 90x^3 + 1504x^4 + \dots). \quad (9)$$

を得た。この収束半径が0であれば、スピン反転の運動は相互作用のもとで不安定であることが示されたことになる。ratio法で(9)を調べるとその予想は正しいようだが、 x^5 次を計算してこれを裏付けたい。

図1の T_c や、 T_c 以下の物性を調べるため、我々はモンテカルロシミュレーション(MCS)を行った。(5)の二つの項が非可換のため、鈴木-Trotter公式により次元が1高いIsing系に変変した。

$$q = (1/N) \sum_{j=1}^N \left[(1/n\tau) \sum_{k=1}^n \sum_{t=1}^{\tau} \sigma_{jk}(\tau) \right]^2$$

(τ =MCステップ数, n =Trotter次元の格子数)で定義されたオーダーパラメータを、 $\Delta/\tilde{J}=1$ の時計算した結果が図2である。エラーバーはサンプル平均。図より $T_c \sim 0.7\tilde{J}$ となり図1と大体一致する。又 $\Delta/\tilde{J}=2$, $T/\tilde{J}=0.1$ で行ったMCSでは、予備的段階であるが、 $q \sim 0.7$ が得られ大きな Δ でも T_c があることを示している。

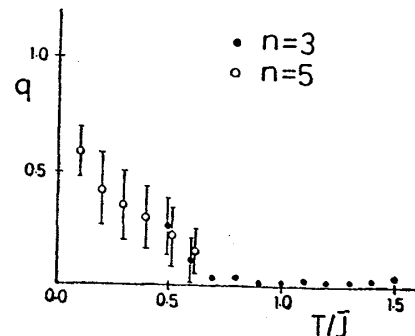


図 2

§1や§2で調べたようなIsing成分への非対角項の効果は、スピン凍結に逆らうものの結局は凍結を許す。これは分散を伴った長距離力の系、SKモデルの構造を反映したもので、短距離力の現実の系では異った様相も現れるに違いない。

文 献

- 1) M. Mézard et al., Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 1156.
- 2) R. A. Klemm, J. Phys. **C12** (1979) L735.
- 3) A. J. Bray and M. A. Moore, J. Phys. **C13** (1980) L655.
- 4) H. J. Sommers, J. Magn. Magn. Mater. **22** (1981) 267.

- 5) P. Fazekas and P. W. Anderson, Phil. Mag. **30** (1974) 423.
小口武彦, 物性研究 **44** (1985) 323.
- 6) L. R. Walker and R. E. Walstedt, Phys. Rev. Lett. (1977) 514, Phys. Rev. **22** (1980) 3816.
- 7) H. Alloul and P. Mendels, Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 1313.
- 8) H. Ishii and T. Yamamoto, J. Phys. C to be published.
- 9) A. J. Fiory, Phys. Rev. **B15** (1971) 614.
- 10) 谷田, 石井, 未発表.
- 11) A. Yanase et al., J. Phys. Soc. Japan **41** (1976) 1108.

量子的なスピングラスの基底状態の数値的研究

東工大 西森秀稔, 小口武彦, 田口善弘

スピングラスの平均場理論は Edwards-Anderson 以来古典スピン系については多様な展開がなされて来たが, 量子効果がどういう役割を果すかはあまり良くわかっていない。われわれはスピン 1/2 の Heisenberg モデルにおいてすべてのスピンペアがランダムに相互作用をしている場合を取り上げ, 有限系の数値的対角化の方法により基底状態の性質を調べた。

$$H = -2 \sum_{i < j} J_{ij} S_i \cdot S_j \quad (1)$$

なる Hamiltonian で, 相互作用は

$$J_{ij} = \tilde{J}_0 / (N-1) \pm \tilde{J} / \sqrt{N-1}$$

±の符号にランダムネスが入る。物理量の配位平均が満足のいく収束を示すまでランダムサンプリングを繰り返す (サンプル数 300 ~ 8000) ため, 系の大きさが $N \leq 14$ までが現在のスーパーコンピュータでの実用的な計算時間での限界となる。

まず基底エネルギーは, 図 1 に示すように $\tilde{J}_0 = 0$ で -0.48 ± 0.01 という値をとることがわかった。この値は上の Hamiltonian (1) で XY 成分を落とした Ising-

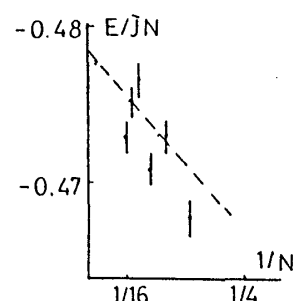


図 1