

氏 名	伊 典 田 健 敏		
授 与 学 位	博 士 ( 工 学 )		
学位授与年月日	平成 5 年 3 月 25 日		
学位授与の根拠法規	学位規則第 5 条第 1 項		
研究科, 専攻の名称	東北大学大学院工学研究科 (博士課程) 応用物理学専攻		
学 位 論 文 題 目	モンテカルロ・スピン動力学法による ハイゼンベルグスピングラスの研究		
指 導 教 官	東北大学教授 猪苗代 盛		
論 文 審 査 委 員	東北大学教授 猪苗代 盛	東北大学教授 渡邊 剛	
	東北大学教授 宮崎 照宣	東北大学教授 平井 正光	
	東北大学教授 松原 史卓		

## 論 文 内 容 要 旨

スピングラス相 (SG 相) は, CuMn, AuFe などの希薄合金において最初に発見された。以来スピングラス相は, 強磁性, 反強磁性相とは異なる特異な性質を持つことから, 大きな興味もたれてきた。実験的研究によって, 希薄合金ばかりでなく, アモルファス合金, 混晶等, 数多くの物質でスピングラス相が存在する事が分かってきた。さらに, それらの物質では, 強磁性 (または反強磁性) 転移した後, スピングラス相が出現するリエントラント相転移が観測されており, 大きな興味を持たれている。

理論的には解析的に解ける無限長距離相互作用を持つモデルが提案され, くわしく調べられてきている。このモデルでは, スピングラス相, リエントラント相が出現することが明らかにされた。特に, 無限長距離相互作用を持つハイゼンベルグモデルでは強磁性とそれに垂直なスピン凍結が共存するリエントラント混合相が出現し, 実験的に観測されるリエントラント現象との関連が議論されている。しかし, これらのモデルは相互作用の働く距離が無限長である点で現実離れしており, 現実のスピングラス相, リエントラント相が出現する機構を本質的に明らかにしているとはいえない。

より現実的なモデルとして, 短距離相互作用を持つモデルも研究が進められてきた。特にくわしく調べられているのが,  $\pm J$  イジングモデルである。当初, 短距離相互作用系でスピングラス相転移が起こるか否かの議論がなされた。しかし, 計算機シミュレーションによる精力的な研究により

3次元イジング系ではスピングラス相が出現することが明らかにされ、その諸性質がくわしく調べられてきている。また、短距離相互作用イジングモデルではリエントラント相転移は起こらない事も明らかになってきた。

典型的スピングラス物質  $\text{CuMn}$  や  $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$  などでは異方性は小さく、ハイゼンベルグ的である。しかし、イジングモデルと比べてハイゼンベルグモデルの研究はあまり進んでいない。特に、最近接相互作用を持つハイゼンベルグモデルでスピングラス相転移が起こるか否かの基本的な問題も未だ解決されているとは言い難い。さらに、理論的に予測されているリエントラント混合相が短距離相互作用モデルで実現するか否か、そのメカニズムについては殆ど調べられていない。これらの最大の理由は、従来のモンテカルロ法ではシミュレーションに莫大な計算時間を必要とするためである。

本研究では、現実存在するスピングラス相とリエントラント相が出現する機構を明らかにする目的で、短距離相互作用  $\pm J$  ハイゼンベルグモデルのシミュレーションを行った。この目的のために新しいシミュレーション法、ハイブリッド・モンテカルロ・スピン動力学法 (HMCS D 法) を開発した。この方法は、従来のモンテカルロ法では考慮されていなかったスピンの動力学 (歳差運動) を導入しモンテカルロ法と組み合わせたものである (図 1)。動力学によって、より現実にも似たシミュレーションを行うことができ、さらにシミュレーションの効率を著しく向上させる事が出来た (図 2)。しかも、モンテカルロ法と HMCS D 法の効率の差は低温になるほど大きくなる。

等方的ハイゼンベルグモデルでは、スピングラス相転移が起きないと考えられてきたが、従来のシミュレーションでは結論的な結果が得られたとは言い難かった。本研究では、オーダーパラメータのステップ数依存性 (図 3) や帯磁率がキュリー則に従う事などで、スピングラス相転移がないことを初めて明瞭に示した。さらに、強磁性相転移が起こる臨界濃度  $P_c$  と強磁性領域におけるランダムなスピンの凍結の有無を調べ、 $\pm J$  ハイゼンベルグモデルの温度-濃度平面での相図 (図 4) を初めて明らかにした。

スピングラス相転移に関する局所的ランダム異方性の効果について以前から議論されてきていた。しかし、シミュレーションでそれに関するはっきりした結果は出されていなかった。特に短距離相互作用モデルにおける異方性効果に関する研究の報告は未だなかった。この理由は有効なシミュレーション法が無かったため、低温におけるスピングラス・オーダーパラメータの出現がスピン凍結に起因するのか、それとも単にスピンの運動が緩慢になった事によるのか区別できなかったからである。

本研究で開発した HMCS D 法はこの区別を可能にした。事実、等方的モデルにおいてはオーダーパラメータはモンテカルロステップを増やすと急速に消えてくる。一方、異方性は劇的な効果を示し、低温においてオーダーパラメータがほとんどステップ数依存性を示さなくなった (図 5)。本研究では熱平衡状態の性質を調べるためにスピングラス帯磁率を調べ、異方性がスピングラス相転移を誘起する事を初めて明らかにした (図 6)。また、強磁性領域で強磁性相から混合相 (強磁性とそれに垂直なスピングラスが共存した相) へのリエントラント相転移を見つけた (図 7)。ここで注意すべき点は異方性が存在するときのみ混合相が起こることであり、また、強磁性によって誘

起されたランダム磁場がリエントラント相転移を不明瞭にすることである。

ここで調べたモデルは単純化されたモデルで現実の物質と対応しているとは必ずしも言いがたい。しかしスピンのハイゼンベルグ的であり、相互作用が短距離であるという点で従来盛んに研究されてきたイジングモデル、無限長距離相互作用モデルに比べて現実的である。また、ここで考えた異方性は現実存在する双極子相互作用をもとにしたものである。今回はシミュレーション上の制約から異方性の大きさを現実の双極子相互作用と比較してかなり大きくせざるを得なかった。しかし、異方性の大きさを変えても定性的な差が現われなかったことを考えると、今回調べたモデルは現実の系をかなり忠実に再現していると考えられる。

このモデルの解析により帯磁率のカスプ的ピーク、スピンの緩和時間の増大など、スピングラス相転移の特徴を説明できた。また、多くの物質で観測されているリエントラント現象に対する多くの知見を得ることができた。特にここでくわしく解析したようにリエントラント現象がGT転移であることが明らかにされた。また、実験で広く観測されている相境界がぼやけることが初めて強磁性によって誘起されるランダム磁場によるものであることが初めて明らかにされた。得られた相図(図8)は実験的に得られている相図を定性的に再現した。

これらの結果より、スピングラス現象に関してランダム異方性が重要な役割を演じる事が明らかにされた。本研究で得られた結果は、SG物質の実験的研究の理解の助けになるものと考えられる。

最後に強調すべきことは、この研究で開発したHMCS法は磁性体のより現実的なシミュレーション法であり、従来のモンテカルロ法では不可能であった時間をあからさまに扱う事が可能になった点で、工学的にも多くの応用が考えられる。また、この方法はスピングラス等の複雑なスピン構造を持つ系を扱う場合には特に効率が良くなり、今後のスピン系の研究に大きな貢献をすることが出来るものと思われる。

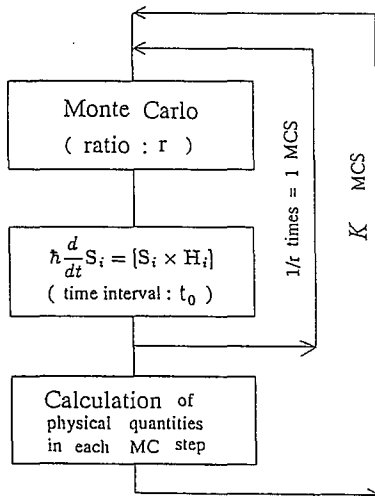


図1：モンテカルロ・スピン動力学法のフローチャート

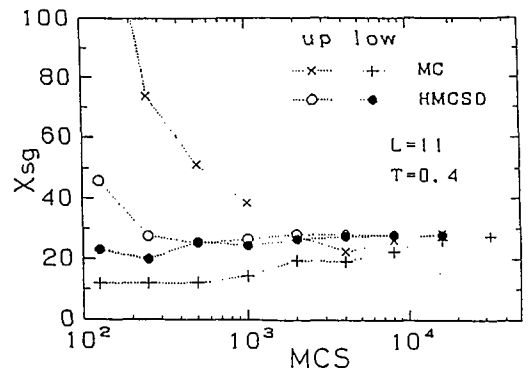


図2：スピングラス帯磁率による効率の比較。上限(up)と下限(low)の値が一致する為に必要ステップ数によって、効率が比較できる。

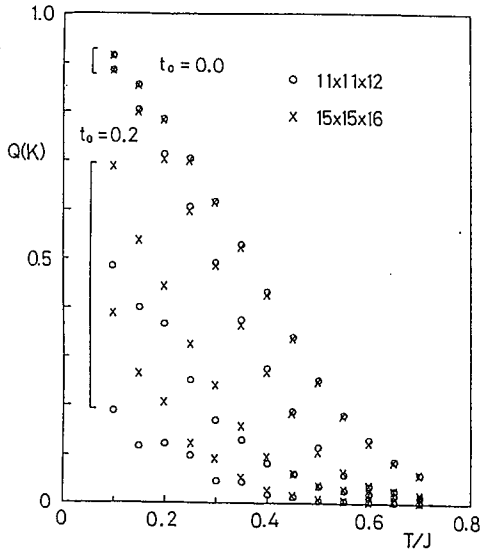


図3 : SGオーダーパラメータの温度依存性。  
 $t_0=0.2$ がHMCSO法の結果：同じシミュレーション同士では、上の方が1000ステップ、下の方が4000ステップ。

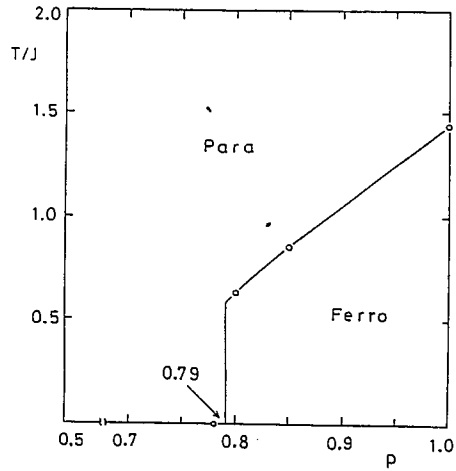


図4 : 等方的土Jハイゼンベルグモデルの相図

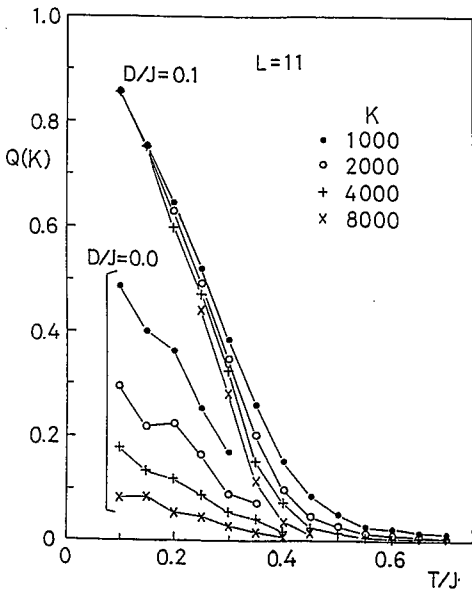


図5 : SG オーダーパラメータの温度依存性。  
 $D/J=0.1$ が異方性の存在する場合の結果：Kはステップ数である。

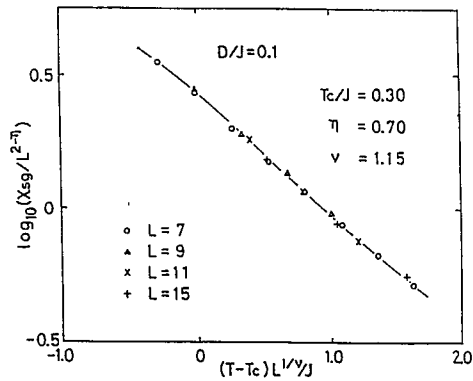


図6 : スピングラス帯磁率の有限サイズスケールリング：曲線はガイドラインである。

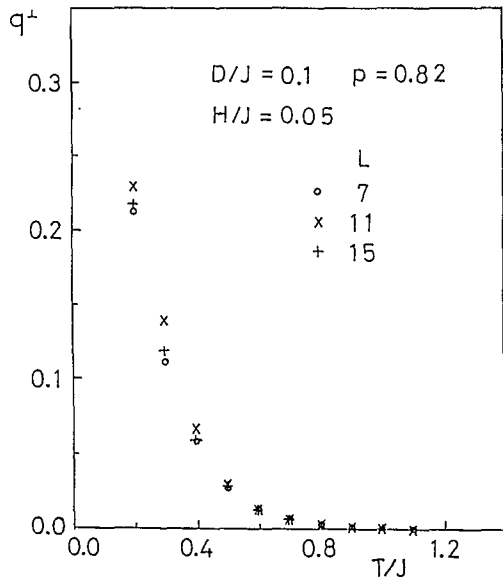


図7 : SG オーダーパラメータの垂直成分の熱平衡値

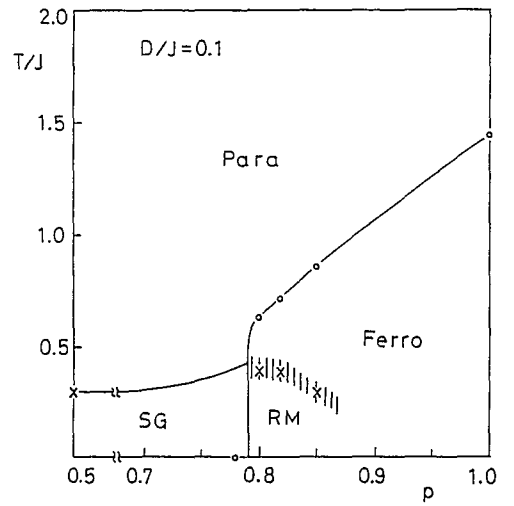


図8 : 異方性 $J$ ハイゼンベルグモデルの相図。RMがリエントラント混合相である。

## 審査結果の要旨

本研究は、計算物理学の分野においてスピン系の物性研究に対して従来用いられてきたモンテカルロ法にスピンの動学的運動を組み込んだ新しいシミュレーション法を提案したものである。さらにこの新手法を土Jハイゼンベルグスピン系に適用し、コンピュータによるシミュレーションでの緩和時間を大幅に短縮出来ることを示し、またランダム異方性のある場合にスピングラス相転移が存在することを示したものである。

第一章は序論である。第二章では土Jハイゼンベルグモデルに対して、従来のモンテカルロ法を用いる研究について述べている。第三章はスピングラスに関連する問題として、特に低温領域でのモンテカルロ法の困難さを指摘している。第四章は本研究の目的を述べている。第五章ではモンテカルロ法にスピン系の動力学を組み込んだ新しいシミュレーション法として混合モンテカルロスピン動力学法(HMCSD)を提案し、そりが強磁性体や反強磁性体に対して従来のモンテカルロ法と一致する結果を導くことを示した。さらに土Jハイゼンベルグモデルにこの新手法を適用し、シミュレーションにおける緩和現象の計算時間が大幅に改善されることを示した。これは計算物理学上、画期的に成果である。第六章では、等方的なモデルにこの手法を適用して、の結果とスケーリングプロットから、有限温度ではスピングラス相転移が存在しないことを示した。第七章ではランダムな小さい異方性のある土JハイゼンベルグモデルにこのHMCSD法を適用して、スピングラス相転移の存在を示し、さらに強磁性濃度領域で混合相へのリエントラント転移が存在することを示した。第八章は結論である。

以上要するに本論文はコンピュータシミュレーションでの新手法を世界で初めて提案し、その画期的な有効性をスピングラス問題で示し、一方スピングラス相転移の存在をもコンピュータシミュレーションで初めて示したもので、応用物理学の進歩に寄与するところが多大である。

よって、本論文は博士(工学)の学位論文として合格と認める。