



Title	希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的性質
Author(s)	寺尾, 貴道
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第3653号
Issue Date	1995-03-24
DOI	https://doi.org/10.11501/3082656
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/51269
Type	doctoral thesis
File Information	000000285107.pdf



希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的性質

寺尾 貴道

①

学位論文

希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的性質

北海道大学大学院

工学研究科応用物理学専攻

寺尾 貴道

目次

第1章 序論	1
第2章 希釈反強磁性体	
2.1 パーコレーション・ネットワーク	6
2.2 パーコレーション系の動的性質	13
2.3 パーコレーション反強磁性体	23
第3章 反強磁性フラクトン	
3.1 スケーリング理論	32
3.2 状態密度および分散関係	40
3.3 固有ベクトル	52
第4章 希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的構造因子	
4.1 従来の研究	55
4.2 パーコレーション臨界濃度の場合 - single-length-scaling 仮説 -	66
4.3 $p > p_c$ での数値計算結果	71
4.4 ブリルアンゾーン境界でのエネルギースペクトル	80
第5章 大規模数値計算アルゴリズム -強制振動子法の拡張-	

5.1 非対称行列の固有値問題	95
5.2 動的構造因子	109
第6章 結論	116
謝辞	120
参考文献	121

第1章 序論

自然界に存在する物質は何らかの形でランダムネスを含んでいる。アモルファスやスピングラス、多孔媒質、液体金属、また電子やフォノンのアンダーソン局在の問題に代表されるように、ランダム系の性質を明らかにする事は物性物理学における重要な課題の一つである [1]。近年、トポロジカルに乱れた系（ネットワークの乱れをもつ系）の性質を理解する上で、パーコレーション・ネットワークというモデルが関心を集めており、この系における物理現象が、様々な観点から研究されている [2-5]。1977年に B. B. Mandelbrot [6, 7] が導入したフラクタルという概念は、ランダム系の物理学における研究に新しい視点を与えた [8, 9]。フラクタルとは、スケール変換に対して不変であるという性質 (dilation symmetry) を有するものである。フラクタルは、シルピンスキー・ギャスケット (図 1.1) に代表される決定論的フラクタル (deterministic fractal) と、厳密には自己相似ではないが、統計的に自己相似性を持つランダム・フラクタルの2種類に大別され、パーコレーション・ネットワークは後者に属する。パーコレーション・ネットワークにおいては、系の相関長 ξ という特徴的な長さが存在する。相関長よりも短いスケールでは、自己相似性（フラクタル性）が存在し、相関長よりも長いスケールでは、ユークリッド的な一様構造と見なすことができる。また臨界濃度 p_c というある特別な濃度の近傍では相関長は発散し、系は臨界的な挙動を示す。すなわち、比熱、帯磁率などの物理量が、臨界濃度近傍でべき的に振舞うことが知られている。

乱れた磁性体の物理的性質は、理論・実験の両面から調べられてきた [10]。その中でも、磁性体中の磁性原子を非磁性原子で希釈したものである“希釈磁性体”（パーコレーション磁性体）は、パーコレーション、相転移、ランダム磁場効果など、様々

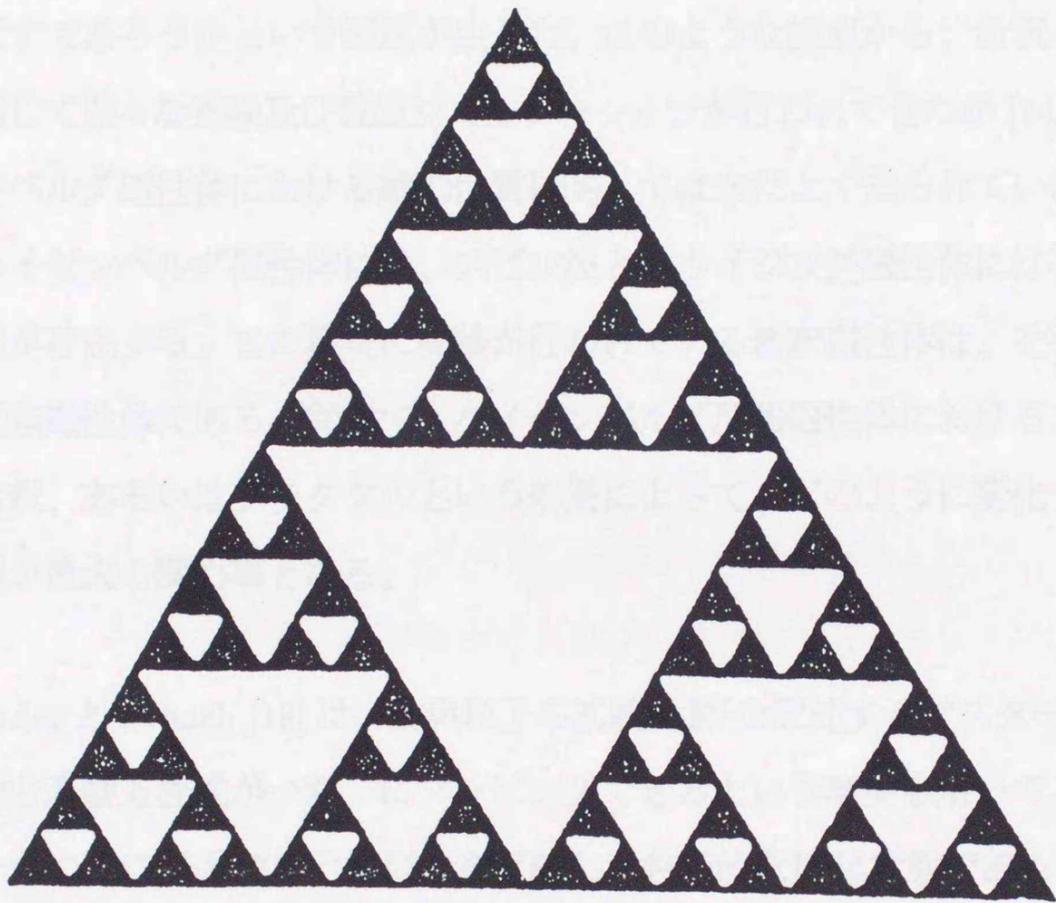


図 1.1 シルピンスキー・ギャスケット

な観点から興味の対象となっている [11-13]。希釈磁性体は、理想的なパーコレーション構造をもつ系である。最近、この系のパーコレーション臨界濃度 p_c 近傍における動的性質が注目されている。磁性原子濃度 p が p_c に十分近ければ、パーコレーション相関長 $\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$ (ν は臨界指数) は十分長く、 ξ より小さな長さスケールでスピンのネットワークはフラクタルになっていると見なせる。従ってこの自己相似性が、系の動的性質 (スピン波励起、スピン拡散、緩和、...) にどのような影響を及ぼすであろうかという問題が生じた。このような観点から、希釈イジング磁性体に関して様々な実験及び数値シミュレーションが行われてきたが [14-17]、希釈ハイゼンベルグ磁性体における動的性質に関しては未だよく知られていない問題が多い。ハイゼンベルグ磁性体には、スピン波というイジング磁性体には存在しない励起状態が存在する。また現実には実験が行われている希釈磁性体は、そのほとんどが希釈反強磁性体である。従って、ハイゼンベルグ反強磁性体におけるスピン波励起が、希釈、あるいはフラクタルという効果によって、どのように変化するのかという問題が最大の関心事となる。

Alexander と Orbach [18] は、古典粒子の拡散現象¹を記述するマスター方程式と、格子振動の運動方程式が一对一にマッピングできるという事実を用いて、フラクタル構造をもつ系には系の自己相似性を反映した特徴的な励起状態である“フラクトン”が存在すると主張した。それによるとフラクトンは、系の自己相似性を反映して分散関係や状態密度が特異な振る舞いを示し、その動的性質は系の構造を特徴づけるフラクタル次元 D_f と、フラクトン次元 (スペクトル次元) \tilde{d} という2つの次元で記述できる。またフラクトン次元は系のユークリッド次元 d によらずほぼ $4/3$ に等しい値をとる (Alexander-Orbach conjecture)。これらの研究から、希釈ハイゼン

¹Gefen, Aharony, Alexander はスケールリング理論により、自己相似な系における拡散係数の臨界的挙動を明らかにした [19]。このことから、フラクタル構造における古典粒子の異常拡散が見いだされた。

ベルグ反強磁性体においても、フラクトン励起が存在するのではないかという点に関心をもたれるようになった。

本論文の目的は、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的性質を明らかにする事である。従来この問題に対するアプローチとして、有効媒質近似 (Effective-medium approximation) [20-23] あるいは実空間繰り込みの方法 (Real-space renormalization) [24,25] などによる理論的研究が行われていた。近年、計算機の処理速度の向上、ならびに記憶容量の増大といった性能の向上は目ざましいものがある。物理学の研究において、計算機実験 (計算機物理学) は理論・実験と並ぶ第3の研究手段として確立している [26-28]。相関の強い量子多体系における電子状態や磁性 [29]、カオスやスピングラスに代表されるコンプレックス系 [30,31]、局在-非局在転移 [32] など、解析的なアプローチが困難な問題に対し、計算機シミュレーションは強力なアプローチとなる。パーコレーション系の物理的性質を議論する上でも、乱れによる相関を正しく取り入れる事が必要であるので、計算機実験が必要不可欠である。スーパー・コンピュータの性能を最大限発揮させるためには、それにふさわしいアルゴリズムを用いる事が必要であり、大規模な計算機実験に適した新しい数値計算アルゴリズムの開発の重要性が高まっている。本論文では、大規模計算機シミュレーションに適した数値計算アルゴリズムの開発を行い、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の問題に応用することで、系のランダムネスを直接扱いその動的性質を明らかにした。

本論文の構成について述べる。第2章では、パーコレーション・ネットワークおよび希釈反強磁性体 (パーコレーション反強磁性体) の基本的性質について説明する。第3章では、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体における系の自己相似性を反映した特徴的な励起状態である、反強磁性フラクトンについて述べる。具体的には、スピン波状態密度および分散関係に関するスケーリング理論、及び状態密度に対して行った大規

模数値計算の結果より、反強磁性フラクトンのユニバーサリティー・クラスについて考察する。第4章では、フラクトンの基本的な性質である single-length-scaling 仮説について述べる。また中性子非弾性散乱実験によって直接得られる物理量である、動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の振る舞いについて明らかにする。Uemura と Birgeneau [33,34] は、弱い異方性をもつ3次元希釈ハイゼンベルグ反強磁性体である、 $\text{Mn}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{F}_2$ に対する中性子散乱実験を行った。彼らの実験に対する解釈、また動的構造因子に対する計算機シミュレーションによって得られた結果との比較について述べる。第5章では、上記の問題に応用されている、本研究で開発された新しい数値計算法について述べる。最近、スーパー・コンピューターに適した数値計算アルゴリズムとして、強制振動子法 (forced oscillator method) が提案されている [35,36]。この方法は今までに、様々な格子振動問題 [35,36] や光の局在 [37] といった系における固有値問題に対して適用されてきた。本論文ではまず実数固有値をもつ非対称行列の固有値問題への拡張を行った。また、動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の数値計算法への拡張も行った。第6章は結論である。

第2章 希釈反強磁性体

2.1 パーコレーション・ネットワーク

パーコレーション・ネットワークとは、トポロジカルな乱れをもつ物理系を記述する代表的なモデルである [2-5]。このモデルは、Broadbent と Hammersley [38] によって導入された。パーコレーションの問題には大きく分けて、格子問題と連続体に関するものがあるが、本論文で取り扱うのは前者である。その代表的な例としてサイト・パーコレーションとボンド・パーコレーションがある (図 2.1(a),(b))。サイト・パーコレーションとは、各格子点をある確率 p で粒子等により占有させ、確率 $(1-p)$ で非占有としたとき、最近接粒子間を連結させてできるクラスターの集合体である。同様にボンド・パーコレーションとは、確率 p で隣接格子間をボンドで結んだときにできるクラスター集合である。パーコレーション・ネットワークは、希釈磁性体におけるスピン・ダイナミクス、シリカ・エアロゲルやガラスなどのランダムな系の格子振動 [39]、乱れた半導体 [40] や金属薄膜 [41] 等における電気伝導等の問題を考える上で有用なモデルである。パーコレーション・ネットワークには、端から端まで無限に広がった大きなクラスターができはじめる臨界濃度 p_c という特別な濃度が存在し、 $p \geq p_c$ で系全体に浸透している無限大クラスターが一個存在する。また臨界濃度 p_c 近傍で系は臨界的な振舞いを示す。この系には相関長と呼ばれる唯一の特徴的な長さ ξ が存在し、これは p_c 近傍で

$$\xi \propto |p - p_c|^{-\nu} \quad (2.1)$$

とべき的に発散することが知られている。ここで ν は系の相関長を特徴付ける臨界指数である。相関長 ξ は、 $p < p_c$ では有限サイズクラスターの平均的な大きさに、

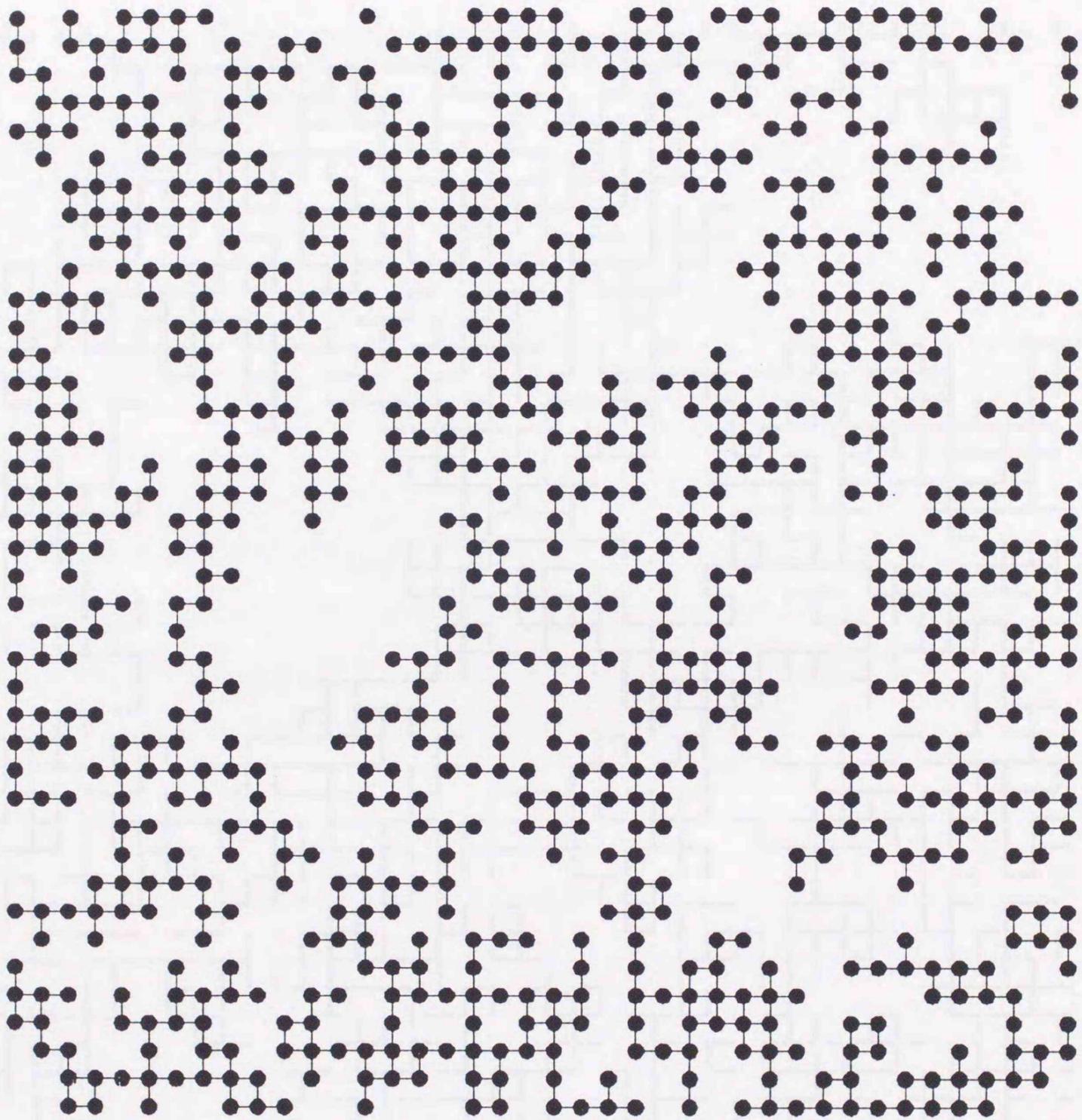


図 2. 1(a) 2次元正方格子に構成されたサイト・パーコレーションの例 ($p = p_c = 0.593$)

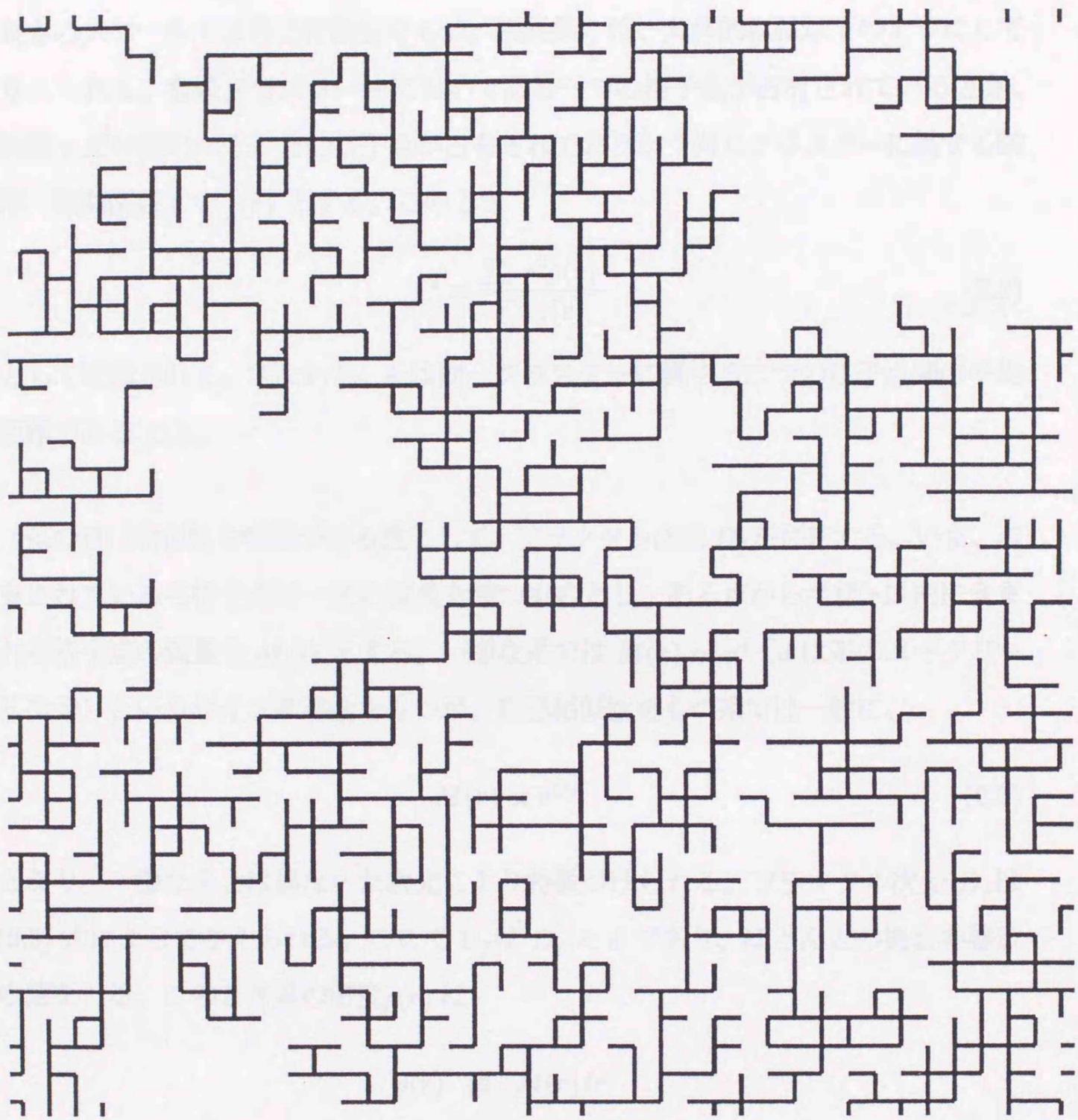


図 2. 1(b) 2次元正方格子に構成されたボンド・パーコレーションの例 ($p = p_c = 0.500$)

$p > p_c$ ではボイド（空隙）の代表的な大きさに各々対応している。パーコレーション・ネットワークは、 ξ より長いスケールでは一様と見なすことができ、 ξ より短い長さのスケールでは自己相似性をもつ。相関長 ξ は、具体的には以下のようにして与えられる。有限クラスター中においてある一つの格子点が占有されているとき、距離 r だけ離れたところの格子点が占有されておりかつ同じクラスターに属する確率（相関関数）を $g(r)$ とする。このとき

$$\xi^2 \equiv \frac{\sum_r r^2 g(r)}{\sum_r g(r)} \quad (2.2)$$

として定義される。すなわち、 ξ は同一クラスターに属する二つの格子点間の平均距離である [2,4]。

系の自己相似性を特徴づける量として、フラクタル次元 D_f が存在する。いま、占有されている各格子点は一定の質量を持つものとし、ある点から半径 r 以内に含まれる格子点の質量を $M(r)$ とする。一様な系では $M(r) \propto r^d$ (d は系のユークリッド次元) というサイズ依存性をもつが、自己相似性をもつ系では一般に、

$$M(r) \propto r^{D_f} \quad (2.3)$$

となり、一様な系とは異なった次元により特徴づけられる。フラクタル次元 D_f は(2.3)式によって与えられる。ここで D_f は $D_f < d$ であり、ほとんどの場合非整数の値をとる。このとき系の密度 $\rho(r)$ は

$$\begin{aligned} \rho(r) &\equiv M(r)/r^d \\ &\propto r^{D_f-d} \end{aligned} \quad (2.4)$$

となり、観測している空間スケールによって系の密度が異なっていることが分かる。パーコレーション・ネットワークにおけるフラクタル次元は、2次元で $91/48$ （厳密

解)、3次元で2.52、また $d(\geq d_c = 6)$ 次元 (d_c はパーコレーション系の上部臨界次元) では4という値をとり、平均場近似での結果と一致する [3]。

パーコレーション系における様々な物理現象について議論する前に、パーコレーション・ネットワークがもつ静的性質 (構造) について述べる。先に述べたように、臨界濃度 $p = p_c$ において系の特徴的長さが消失しており、 $p \geq p_c$ では無限大クラスターが出現する。このことは幾何学的な相転移すなわちパーコレーション転移としてとらえることができ、従来の熱力学的相転移における臨界現象と同様の議論を行うことが可能となる。このことから、臨界指数や、異なる臨界指数の間の関係を与えるスケーリング則に興味をもたれた。すなわち、系の相転移を特徴づけるオーダー・パラメーター $P(p)$ を考えることが出来る。 $P(p)$ は、格子点が無限に大きなパーコレーション・クラスターに属している確率として定義され、

$$P(p) \begin{cases} = 0 & (p < p_c) \\ > 0 & (p > p_c) \end{cases} \quad (2.5)$$

となる。また p_c 近傍 ($p > p_c$) では

$$P(p) \propto (p - p_c)^\beta \quad (2.6)$$

とべき的に振舞うことが知られている。ここで β はオーダー・パラメーターに関する臨界指数である。これは磁性体の熱相転移において、 $T > T_c$ (T_c は転移温度) では常磁性的であり系全体の磁化が0、 $T < T_c$ では磁気的な長距離秩序が出現して磁化が有限の値をとり、 $T = T_c$ の近傍で磁化 M が

$$M(T) \propto (T_c - T)^\beta \quad (2.7)$$

とべき的に振舞うことにそれぞれ対応している。また (有限) クラスターの平均の大きさ $S(p)$ は

$$S(p) \propto |p - p_c|^{-\gamma} \quad (2.8)$$

(γ は臨界指数)であり、 $p = p_c$ でべき的に発散する。図2.2にその様子を示す。図中で $F(p)$ は、任意の格子点が有限の大きさのクラスターに属する確率であり、定義より

$$F(p) = p - P(p) \quad (2.9)$$

である [4]。さらに構造を特徴づける静的な物理量のみならず、動的な物理量、例えば電気伝導度 $\sigma(p)$ も p_c 近傍で、

$$\sigma(p) \propto (p - p_c)^t \quad (2.10)$$

とべき的に振舞う。但し t は電気伝導度に関する臨界指数である。以上で述べたように臨界濃度 p_c 近傍で物理量がべき的に振舞っているのは、系に特徴的長さが存在しないことを反映している。これらの臨界指数は、一般に系の次元のみに依存し、系の格子の種類や、サイト問題であるかボンド問題であるかといった事にはよらない。この性質は、ユニバーサリティーと呼ばれる。これは、系が臨界的で特徴的長さが発散しているとき、この系の性質は隣接格子間の詳細には依存しないことに基づいているといえる。これらの臨界指数とフラクタル次元 D_f の間には、空間次元 d を含む関係式が成立している [2,4]。いま、ある系のシステムサイズを L とする。 L がパーコレーションの相関長 ξ より小さいときは、系全体がフラクタルになっていると見なせるため最大クラスター s_{\max} の大きさは $s_{\max} \propto L^{D_f}$ という L 依存性をもつ。一方、 L が ξ より大きいときは、系は一様と見なせるので $s_{\max} \propto P(p)L^d$ と振る舞う。ここで、 $L \sim \xi$ のとき両者は同程度の値になると考えられるので、

$$\xi^{D_f} \sim P(p)\xi^d \quad (2.11)$$

ゆえに、(2.1) および (2.6) 式より、

$$D_f = d - \frac{\beta}{\nu} \quad (2.12)$$

を得る。

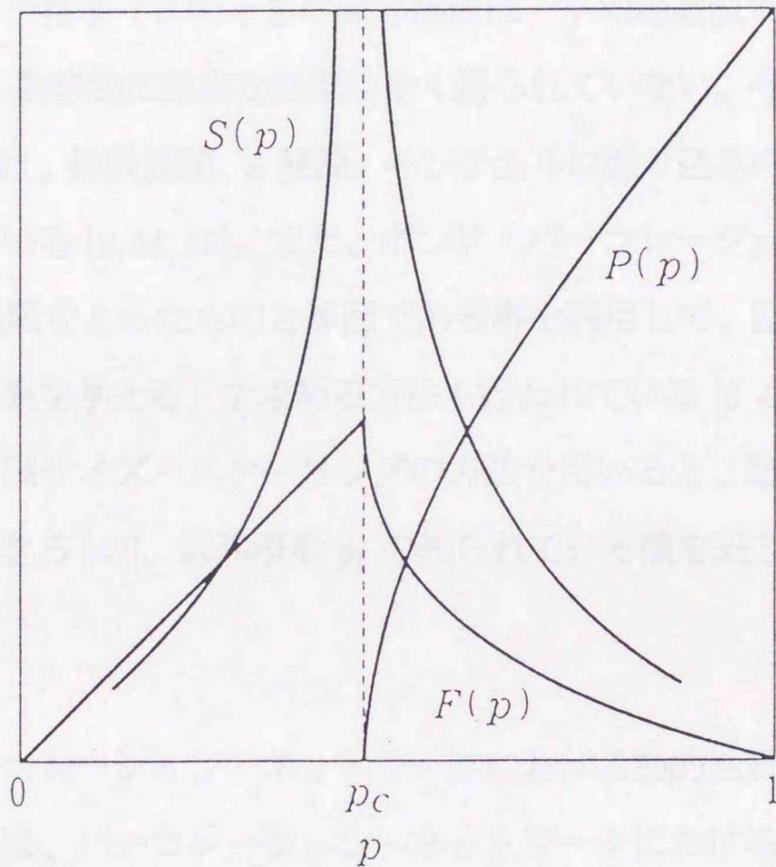


図 2. 2 臨界濃度近傍における物理量の振る舞い [4]

これらの臨界濃度 (p_c) および臨界指数 ($\nu, \beta, \gamma, \dots$) のとる具体的な値であるが、2次元のボンド・パーコレーションに関して、1980年に Kesten [42] は正方格子における臨界濃度 p_c の値が $p_c = 1/2$ であること、1981年に Wierman [43] は三角格子および蜂の巣格子における臨界濃度が各々 $p_c = 2 \sin(\pi/18)$ (≈ 0.347)、 $p_c = 1 - 2 \sin(\pi/18)$ (≈ 0.653) である事を証明している。しかしこのような2次元系、および無限次元の系に対応するベータ格子 (このときの臨界指数は、平均場近似での値になる: 図2.3) の場合を除き、数学的に厳密な結果は全く得られていない。今までに臨界濃度および臨界指数の値は、級数展開、 ϵ -展開、モンテカルロ繰り込みの方法等によって数値的に調べられている [2, 44, 45]。また、ボンド・パーコレーションは q -state Potts model の $q \rightarrow 1$ 極限をとったものと等価である事を利用して、臨界指数 ($d = 2$ の場合には厳密な結果を与える) を求める方法も行われている [3, 46, 47]。実際に数値計算を行う上で有限サイズ・スケーリングの方法を用いると、臨界指数の値を精度よく求める事ができる [48]。臨界濃度 p_c の知られている値を表1に、臨界指数の値を表2に示す [3]。

近年では、パーコレーション・ネットワークにおける動的性質に興味もたれている。次節以降では、パーコレーション・ネットワークにおける動的性質について議論する。

2.2 パーコレーション系の動的性質

パーコレーション系における物理現象として、粒子の拡散、格子振動、電気伝導、緩和現象などが様々な観点から調べられており、それらは系の自己相似性を反映して特異な動的性質を示す事が明らかにされてきた。Gefen、Aharony、Alexander [19]

	サイト	ボンド
d=2 正方格子	0.593	0.500
三角格子	0.500	0.347
六角格子	0.696	0.653
d=3 面心立方	0.712	0.349
BCC	0.645	0.179
FCC	0.619	0.319
六角密置	1	1
配位数 3	1	1

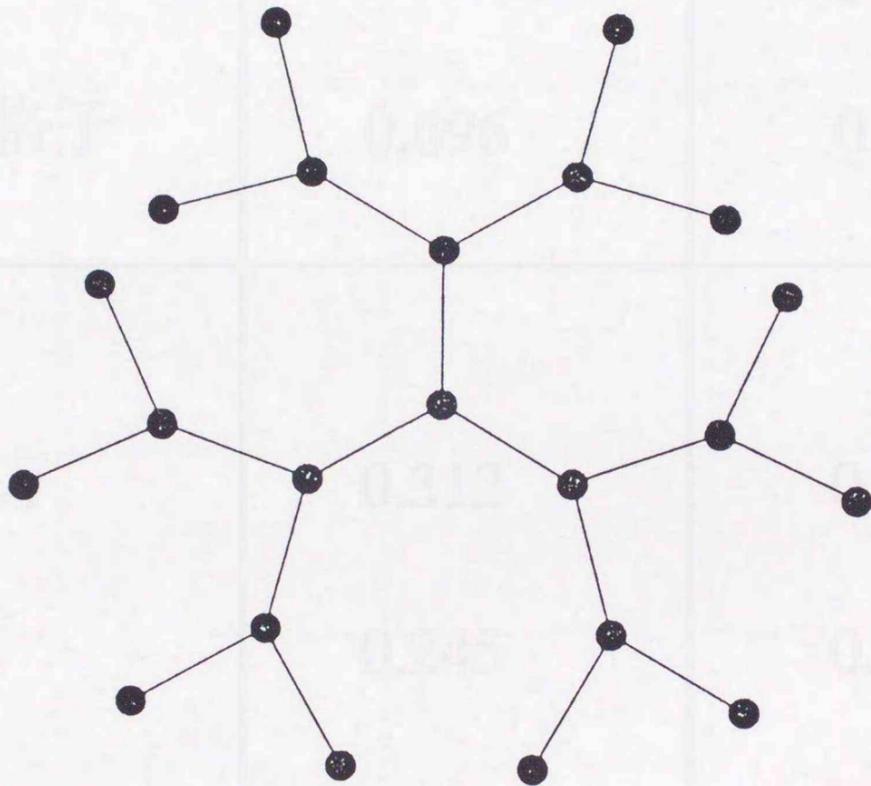


図 2. 3 ベーテ格子

	サイト	ボンド
d=2		
正方格子	0.593	0.500
三角格子	0.500	0.347
蜂の巣格子	0.696	0.653
d=3		
単純立方	0.312	0.249
BCC	0.245	0.179
FCC	0.198	0.119
ベージェ格子 (配位数 z)	$\frac{1}{z-1}$	

表1 パーコレーション臨界濃度の値

	$d=2$	$d=3$	$d \geq d_c (=6)$
β	$5/36$	0.417	1
ξ	$4/3$	0.875	$1/2$
γ	$43/18$	1.795	1
t	1.3	2.0	3

表2 臨界指数の値

は、パーコレーション上の拡散についてスケーリング理論を展開し、パーコレーション上の拡散に対する平均自乗拡散距離の時間依存性が、一様な系における拡散とは異なること、すなわち異常拡散という現象が起こることを初めて明らかにした。彼らの議論によると、浸透閾値 $p = p_c$ における無限大クラスター上の粒子の平均自乗拡散距離 $\langle R^2(t) \rangle$ は、

$$\langle R^2(t) \rangle \sim t^{2/d_w} \quad (2.13)$$

となる。但し、 d_w は無限大クラスターにおけるランダム・ウォークのフラクタル次元である。また $p > p_c$ では、系の相関長 ξ より短いスケールでは、粒子は異常拡散に従い、 ξ より長いスケールでは、系は一様と見なせるので、媒質中の粒子は $\langle R^2(t) \rangle \sim t$ という時間依存性をもつ通常拡散に従う。ただしその時の拡散定数 $D(p)$ は、アインシュタインの関係式より、

$$\begin{aligned} D(p) &\propto \frac{\sigma(p)}{n(p)} \\ &\propto (p - p_c)^{t-\beta} \end{aligned} \quad (2.14)$$

で与えられる。ただし、 $n(p)$ は粒子の密度である。ここで（拡散に寄与する）粒子の密度は、サイトが無限大クラスターに含まれる確率、すなわちオーダー・パラメーター $P(p)$ に比例するので、

$$\begin{aligned} n(p) &\propto P(p) \\ &\propto (p - p_c)^\beta \end{aligned} \quad (2.15)$$

という関係式を用いた。以上まとめると、粒子の平均自乗拡散距離は、

$$\langle R^2(t) \rangle \sim \begin{cases} t^{2/d_w} & t \ll t_\xi \\ (p - p_c)^{t-\beta} t & t \gg t_\xi \end{cases} \quad (2.16)$$

と表される。ただし、 t_ξ は系の唯一の特徴的な時間であり、 $t_\xi \sim \xi^{d_w}$ という関係式に従う。よって粒子の平均自乗拡散距離は、スケーリング関数 $f(x)$ を用いて、

$$\langle R^2(t) \rangle = t^{2/d_w} f(t/t_\xi) \quad (2.17)$$

ただし、

$$f(x) \sim \begin{cases} \text{const.} & x \ll 1 \\ x^{1-2/d_w} & x \gg 1 \end{cases}$$

と書けると仮定する事ができる。このとき $t \gg t_\xi$ において $\langle R^2(t) \rangle \sim t_\xi^{2/d_w-1} t$ となるので、拡散定数 $D \sim t_\xi^{2/d_w-1}$ となる。このことと (2.16) 式から、

$$d_w = 2 + \frac{t - \beta}{\nu} \quad (2.18)$$

という関係式が得られる。一般に臨界指数 t と β の間には $t > \beta$ という関係が存在するので、(2.18) 式より $d_w > 2$ となり、パーコレーション上の拡散は、一様な系のそれに比べて遅くなる。いいかえると、系の自己相似性が成立している空間的スケールにおいては異常拡散が起こることになる。

第1章で述べたように、パーコレーション系の格子振動問題においては、系の自己相似性を反映して、フラクトンと呼ばれるフラクタル系特有の励起状態が存在することが知られている。Alexander と Orbach は、スケーリング理論を用いて、フラクトン励起の状態密度を調べた [18]。彼らは、フラクトンの状態密度 $\mathcal{G}(\epsilon)$, ($\epsilon = \omega^2$) が、拡散問題での原点回帰確率 $\langle P_0(t) \rangle$ の逆ラプラス変換を用いて表せることを利用した。すなわち、

$$\langle P_0(t) \rangle = \frac{1}{N} \int_0^\infty d\epsilon \mathcal{G}(\epsilon) e^{-\epsilon t} \quad (2.19)$$

系のフラクタル次元が D_f ならば、原点回帰確率 $\langle P_0(t) \rangle$ は、異常拡散の影響により (2.13) 式を用いて、

$$\begin{aligned} \langle P_0(t) \rangle &\sim \frac{1}{\{R(t)\}^{D_f}} \\ &\sim t^{-D_f/d_w} \end{aligned} \quad (2.20)$$

と書ける。従って、状態密度 $\mathcal{G}(\epsilon)$ は、 $\mathcal{G}(\epsilon) \sim \epsilon^{D_f/d_w-1}$ となる。振動励起の状態密度 $D(\omega)$ は振動数 ω の関数として $D(\omega)d\omega = \mathcal{G}(\epsilon)d\epsilon$ であるから、 $D(\omega) \sim \omega^{2D_f/d_w-1}$

となることが分かる。ここで Alexander と Orbach は、フラクトン次元 (スペクトル次元) $\tilde{d} \equiv 2D_f/d_w$ という指数を定義し、 \tilde{d} が系の空間次元によらず $4/3$ という値をとると予想した (Alexander-Orbach conjecture)。フラクトン次元 \tilde{d} が系の空間次元によらず一定の値をとるという事が事実であるならば、これは次のような意味をもっている。フラクトン次元 \tilde{d} は、臨界指数 β, ν, t を用いて、

$$\tilde{d} = \frac{2(d\nu - \beta)}{2\nu + t - \beta} \quad (2.21)$$

と表すことができるが、 \tilde{d} の値が一定であるとする、上の式は動的な臨界指数 t と、静的な臨界指数 β, ν を結びつける関係式となり、これらの指数が独立ではないことを主張している事になる。これは決して自明の事ではない。 $p > p_c$ のときは、系の相関長 ξ に対応する特徴的な振動数 $\omega_c (\sim t\xi^{-1/2} \sim \xi^{-d_w/2})$ が存在する。 $\omega \ll \omega_c$ では、拡散問題でいうと通常拡散に対応する領域であり、状態密度は通常のフォノンと同じく $D(\omega) \sim \omega^{d-1}$ に従う。一方、 $\omega \gg \omega_c$ では、異常拡散に対応する領域であり、状態密度は $D(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}-1}$ という振動数依存性をもつことになる。(2.17) 式での議論と同様に、スケーリング仮説より、

$$D(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}-1} f(\omega/\omega_c) \quad (2.22)$$

と置いてみよう。 $\omega \approx \omega_c$ でフォノンからフラクトンへクロスオーバーするということは、スケーリング関数 $f(x)$ が

$$f(x) \sim \begin{cases} \text{const.} & x \gg 1 \\ x^{d-\tilde{d}} & x \ll 1 \end{cases} \quad (2.23)$$

と振舞うことを意味している。

またフラクトン次元は $\tilde{d} < 2$ であることから、フラクトンは空間的に局在している励起状態であることが Rammal-Toulouse によって示されている [49]。その局在長 $\Lambda(\omega)$ の振動数依存性すなわち分散関係は、異常拡散に関する議論との対応から

($t \leftrightarrow 1/\omega^2, d_w = 2D_f/\tilde{d}$ より)、

$$\Lambda(\omega) \sim \omega^{-\tilde{d}/D_f} \quad (2.24)$$

となる。

以上の議論は、系の格子振動を支配する方程式が、粒子の拡散を記述するマスター方程式にマッピングできることに基づいている。格子振動の運動方程式は n サイトの振幅を $u_n(t)$ とすると、

$$\frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = \sum_m K_{nm} \{u_m(t) - u_n(t)\} \quad (2.25)$$

である。但し K_{nm} は n, m サイト間のバネ定数である。同様にマスター方程式は、 n サイトでの粒子の存在密度を $P_n(t)$ とすると、

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \sum_m W_{nm} \{P_m(t) - P_n(t)\} \quad (2.26)$$

(W_{nm} は n サイトから m サイトへの遷移確率) である。上記の2つの方程式から明らかに、振幅 $u_n(t)$ と存在密度 $P_n(t)$ が対応していることがわかる。例えば、強磁性スピン波励起を記述する運動方程式もマスター方程式にマッピングすることが可能であり、フラクトン励起が存在する。但し、スピン波励起の問題では時間に関して一階の微分を含む運動方程式によって記述される点が振動問題とは異なっている。このことから、通常のスピン波励起 (マグノン) の状態密度が $\mathcal{D}(\omega) \sim \omega^{d/2-1}$ となることを反映して、強磁性スピン波フラクトン励起の状態密度 $\mathcal{D}(\omega)$ は、

$$\mathcal{D}(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}/2-1} \quad (2.27)$$

という振動数依存性をもつ。 $p > p_c$ である系においては、 $\omega < \omega_c$ ($\omega_c \sim \xi^{-\tilde{d}/D_f}$) の振動数領域ではマグノンが存在し、 $\omega > \omega_c$ においては強磁性スピン波フラクトンが存在すると考えられる。このような観点から、パーコレーション強磁性体に関するスピ

ン波状態密度の数値計算が行われており、その結果強磁性フラクトンのフラクトン次元 \tilde{d} は振動問題と同じ値($\approx 4/3$)をとることが数値的に確かめられている [50–53]。

Alexander–Orbach conjecture が成立しているか否かを調べる数値的検証は、数多く行われている。代表的な方法として、(i) 格子振動・強磁性スピン波フラクトン励起の状態密度から直接 \tilde{d} の値を求める [51, 53, 54]、(ii) ランダムウォークのモンテカルロ計算により d_w の値を求める [55]、(iii) $p = p_c$ における random resistor network の電気伝導度に対し有限サイズ・スケーリングを用いて t/ν の値を求める [48]、等がある。また、 ϵ -展開を用いた理論的研究も行われている [56]。その結果現在では、 $d < d_c$ において Alexander–Orbach conjecture は近似的にのみ成立していると考えられている。

強制振動子法（後述）による大規模数値計算によって求められた $d = 2, 3, 4$ 次元系における臨界濃度 p_c での振動系の状態密度と積分状態密度を図 2.4 に示す [54]。図中で黒い四角が 2 次元系、黒い三角が 3 次元系、黒丸が 4 次元系の結果にそれぞれ対応している。実際の計算は、ボンド・パーコレーション系において周期境界条件下で行った。系のシステム・サイズは、 $d = 2$ で 1100×1100 (1 サンプル)、 $d = 3$ で $100 \times 100 \times 100$ (3 サンプル)、 $d = 4$ で $30 \times 30 \times 30 \times 30$ (15 サンプル) であり、 $d = 3, 4$ においては各サンプルに関してアンサンプル平均をとった。この結果から求めたフラクトン次元 \tilde{d} の値はそれぞれ、 $d = 2, 3, 4$ 次元系で、 $\tilde{d} = 1.33 \pm 0.01, 1.31 \pm 0.02, 1.31 \pm 0.03$ と求まり、系の次元によらずほぼ一定の値 ($\approx 4/3$) をとっていることが分かる。

本研究の研究対象であるパーコレーション反強磁性体におけるスピン波励起は、次章以降で示すようにスピン波を記述する線形化された運動方程式がマスター方程

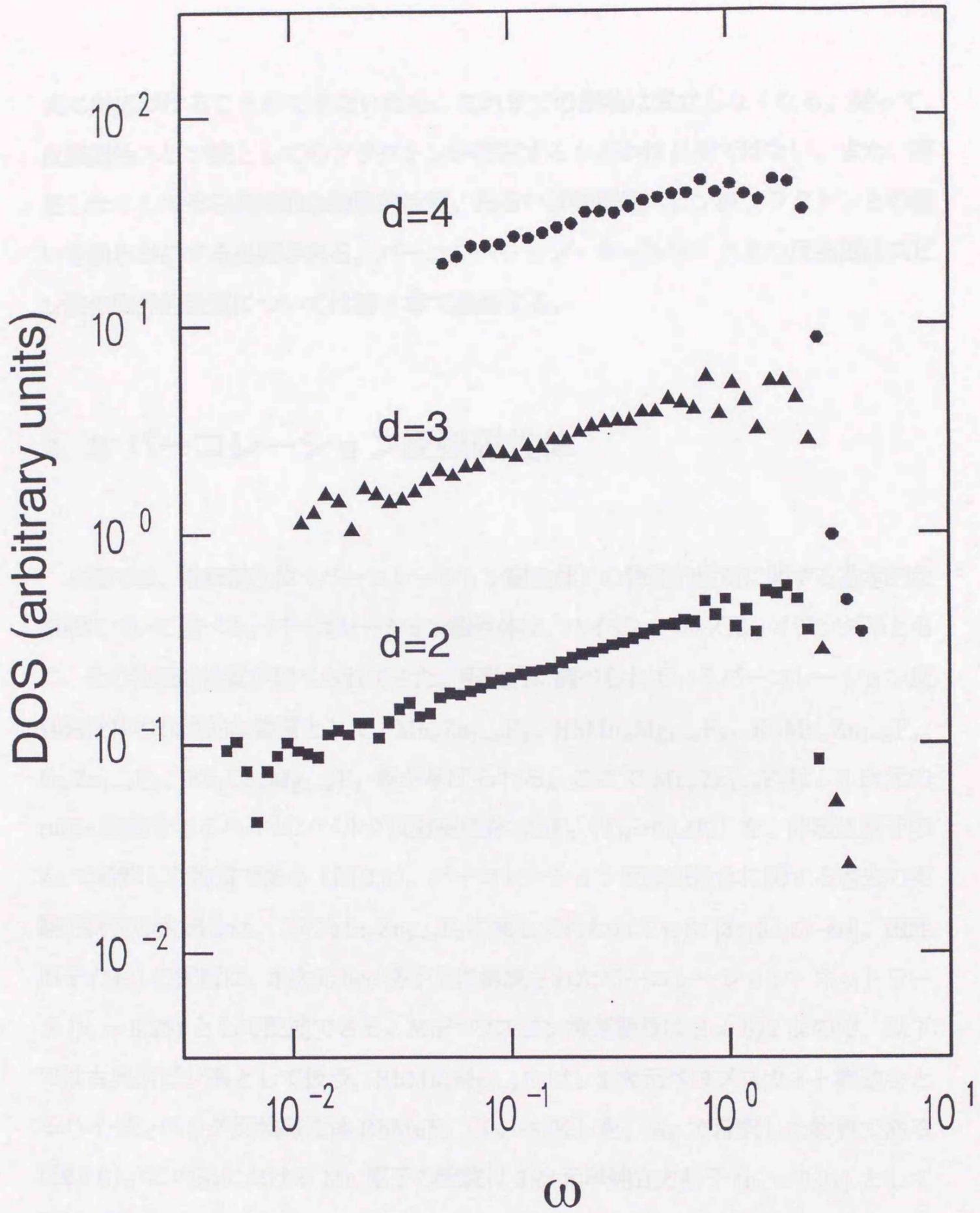


図 2.3 臨界濃度における格子振動フラクトンの状態密度

式に対応づけることができないため、これまでの議論は成立しなくなる。従って、反強磁性スピン波としてのフラクトンが存在するか否かは自明ではない。また、存在したとしてその具体的な物理的性質、あるいは強磁性スピン波フラクトンとの違いを明らかにする必要がある。パーコレーション・ネットワーク上の反強磁性スピン波の臨界的性質については第3章で議論する。

2.3 パーコレーション反強磁性体

本節では、希釈磁性体（パーコレーション磁性体）の物理的性質に関する基本的な事柄について述べる。パーコレーション磁性体は、ハイゼンベルグ系、イジング系ともに、その物理的性質が調べられてきた。実験的に調べられているパーコレーション反強磁性体の代表的な物質として、 $Mn_xZn_{1-x}F_2$ 、 $RbMn_xMg_{1-x}F_3$ 、 $RbMn_xZn_{1-x}F_4$ 、 $Fe_xZn_{1-x}F_2$ 、 $Rb_2Co_xMg_{1-x}F_4$ 等が挙げられる。ここで $Mn_xZn_{1-x}F_2$ は、3次元の rutile 構造をとるハイゼンベルグ反強磁性体 MnF_2 ($T_N=67.4K$) を、非磁性原子の Zn で希釈した物質である (図 2.5)。パーコレーション反強磁性体に関する過去の実験的研究の大部分は、この $Mn_xZn_{1-x}F_2$ に関して行われてきた [33, 34, 57-60]。磁性原子 (Mn) の配置は、3次元 bcc 格子に構成されたパーコレーション・ネットワーク ($p_c = 0.25$) として記述できる。Mn²⁺ のスピン角運動量は $S = 5/2$ なので、以下では古典スピン系として扱う。 $RbMn_xMg_{1-x}F_3$ は、3次元ペロブスカイト構造をとるハイゼンベルグ反強磁性体 $RbMnF_3$ ($T_N=82K$) を、Mg で希釈した物質である (図 2.6)。この系における Mn 原子の配置は 3次元単純立方格子 ($p_c = 0.31$) として記述できる。この系は異方性が極めて小さく、また次近接相互作用も極めて小さいので、等方的ハイゼンベルグ型のパーコレーション反強磁性体として非常に理想的な物質であるといえる [61-63]。このような等方的なパーコレーション反強磁性体の

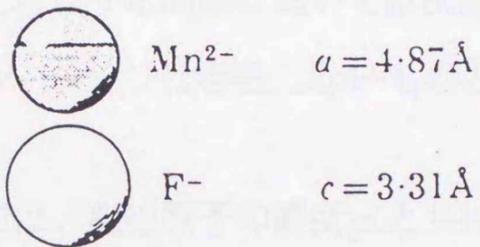
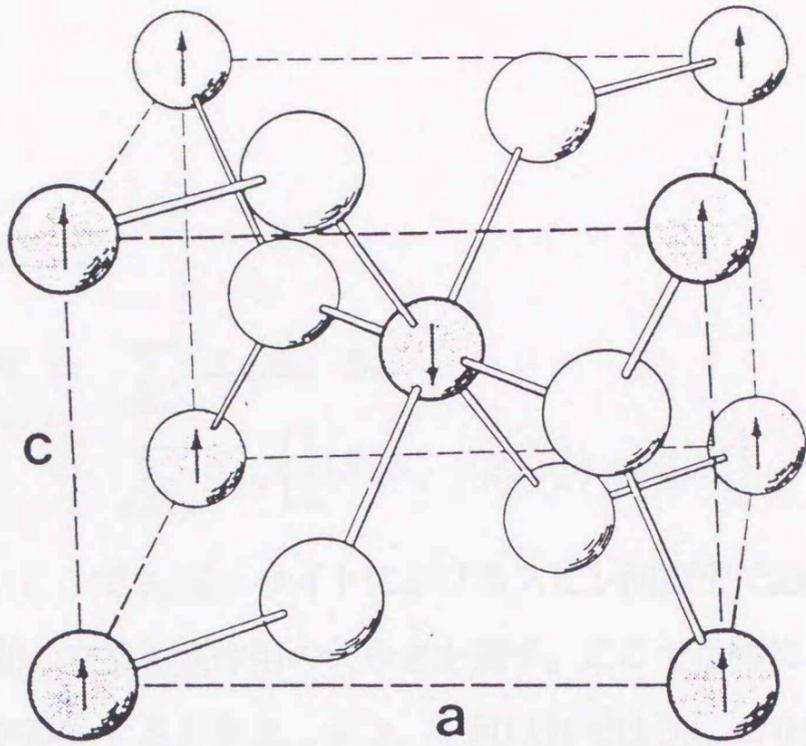


図 2. 5 MnF₂の結晶構造

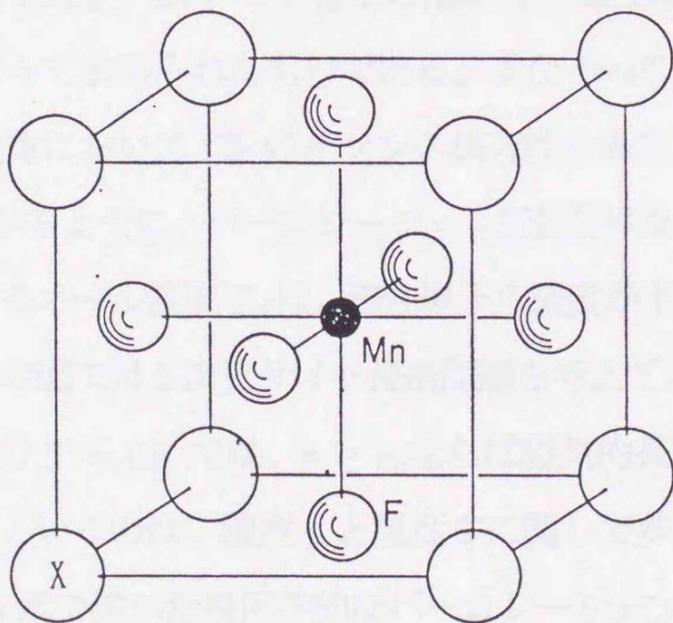


図 2. 6 ペロブスカイト型 XMnF₃(X=Rb,K)の結晶構造

ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{\langle mn \rangle} J_{mn} \mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n \\ &= \sum_{\langle mn \rangle} J_{mn} \left\{ \frac{1}{2} (S_m^+ S_n^- + S_m^- S_n^+) + S_m^z S_n^z \right\}\end{aligned}\quad (2.28)$$

で表す事ができる。ここで \mathbf{S}_n は n サイトにおけるスピン演算子である。 J_{mn} は m サイトと n サイトの間の交換相互作用の大きさを表す。ここでは特に、最近接サイトに共に磁性原子が存在するとき $J_{mn} = J$ 、それ以外では $J_{mn} = 0$ という値をとるものとする。すなわち、本論文で考察する問題においては次近接相互作用などの効果は無視する。また、フラストレーションは存在しないものとする。

パーコレーション反強磁性体では、磁性原子の濃度 p と共に、温度 T が重要なパラメーターとなる。2次元正方格子上的 phase diagram を図 2.7 に示す [12]。この図で横軸は磁性原子の濃度 (p)、縦軸は純粋系 ($p = 1$) と希釈系における Néel 温度の比を表したものである。² 図中で一番上の点線は、磁性原子の濃度 $p \rightarrow 1$ の極限で平均場近似によって求められたものである。また“real”という点線は、2次元ハイゼンベルグ磁性体において1%のイジング異方性を考慮した場合を表している [12]。図 2.7 から分かるように、パーコレーション反強磁性体の場合、系の磁気的な長距離秩序が出現するネール温度 T_N は、磁性原子の濃度が下がるにつれて低くなり、臨界濃度 p_c で (この図では2次元サイト浸透問題を考えているので $p_c = 0.593$) $T_N \rightarrow 0$ となる。つまり $T = 0\text{K}$ では、 $p \geq p_c$ ならば磁気的な長距離秩序が存在しており、 $(p, T) = (p_c, 0)$ というのは、濃度 p と温度 T に関して多重臨界点になっている。この系には、(2.1) 式で述べた幾何学的なパーコレーションの相関長 $\xi = \xi_p$ の他に、熱的な相関長 (thermal correlation length) ξ_T が存在する。 ξ_T は、具体的にハイ

²この図において、ハイゼンベルグ系には微小な3次元的な相互作用が存在して、磁気的な長距離秩序への相転移が存在するものとする [12]。

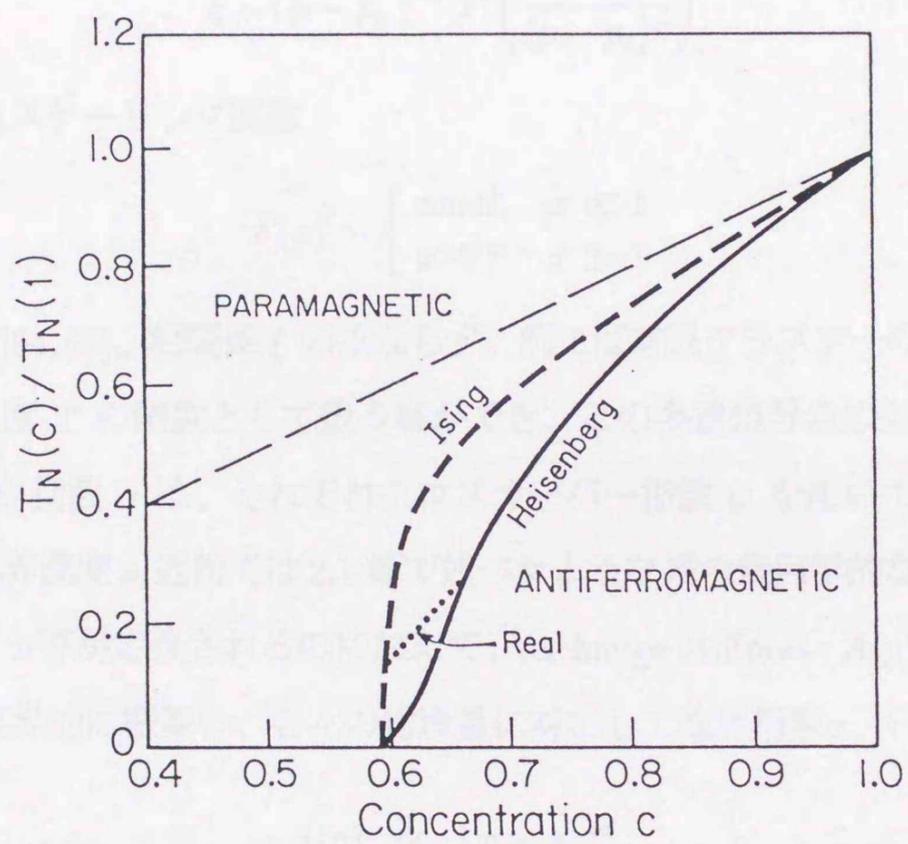


図 2. 7 パーコレーション反強磁性体の phase diagram ($d = 2$) [12]

磁性体の場合

$$\xi_T \sim T^{-\nu/\varphi} \quad (T_N = 0) \quad (2.29)$$

と表される事が知られている。ここで、 φ はクロスオーバー指数である。系のスピン相関を特徴付ける相関長 ξ は一般に $\xi = \min(\xi_p, \xi_T)$ で与えられるので、有限温度におけるハイゼンベルグ磁性体においては

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu} F\left(\frac{T}{(p - p_c)^\varphi}\right) \quad (2.30)$$

但し、 $F(x)$ はスケーリング関数

$$F(x) \sim \begin{cases} \text{const.} & x \ll 1 \\ x^{-\nu/\varphi} & x \gg 1 \end{cases}$$

と表せられる [64,65]。相関長 ξ のみならず、例えば有限クラスターの平均大きさ S も濃度 p と温度 T の関数として扱う事ができ、この多重臨界点の近傍で濃度と温度に関する臨界指数 γ は、それぞれクロスオーバー指数 φ を用いて結びついている。³また、臨界濃度 p_c 近傍では2.1節で述べたような系の幾何学的な構造を記述する臨界指数 β 、 ν 等が定義されるのに加えて、exchange stiffness $A(p)$ 、また垂直帯磁率 $\chi_\perp(p)$ が臨界的に振舞い、各々の物理量に対応して臨界指数 σ 、 τ を

$$A(p) \propto |p - p_c|^\sigma \quad (2.31)$$

$$\chi_\perp(p) \propto |p - p_c|^{-\tau} \quad (2.32)$$

と定義することができる。垂直帯磁率 $\chi_\perp(p)$ が $p = p_c$ で発散するのは、磁化の局所的な揺らぎによるものであり、系の長距離秩序が消失することを反映している。Harris と Kirkpatrick [67] は3次元系における数値計算により、 $\sigma = 1.6 \pm 0.1$ 、 $\tau = 0.5 \pm 0.2$ という値を得ている。また Ziman [68] は、同じく3次元系において垂直帯磁率 χ_\perp のシステムサイズ依存性より、 $\tau = 0.79 \pm 0.1$ という値を得ている。

³ イジング磁性体においては、熱的相関長は温度に対してべきではなく指数関数的に振る舞う [66]。

最後に、イジング型のパーコレーション反強磁性体に関する従来の研究についてふれる。Ikeda ら [69] は、 $\text{Rb}_2\text{Co}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ に関する弾性散乱（磁気ブラッグ散乱）の実験を行い、パーコレーション磁性体中の無限大クラスターのフラクタル次元 D_f を調べている。これは2次元正方格子上的イジング磁性体 Rb_2CoF_4 ($T_N=102.96\text{K}$) を、非磁性原子の Mg で希釈した物質である。一般にフラクタル構造をとる物質において、中性子の散乱強度 $I(q)$ は、

$$I(q) \sim q^{-D_f} \quad (2.33)$$

という波数依存性をもつ事が知られている。Ikeda ら [69] による $p = 0.60$ ($p_c = 0.593$) に関する実験結果を図 2.8 に示す。この結果から彼らは、 $D_f = 1.95 \pm 0.07$ という結果を得ている。

イジング型のパーコレーション反強磁性体におけるスピン拡散は、古典粒子の異常拡散とは異なり、通常の dynamical scaling ($\tau \sim \xi^z$) には従わないことが知られている。ここで τ は緩和時間であり、パーコレーション・ネットワーク上でイジング磁性体中のドメイン壁が距離 ξ 程度拡散するのに (longitudinal dynamics) 要する時間である。このとき、 $\tau \propto \xi^{A \log \xi + B}$ (A, B は定数) という特異な関係式に従う事が、理論及びモンテカルロ・シミュレーションから明らかにされている [15, 16, 70]。このことは、ドメイン壁がパーコレーション・ネットワーク中のノードやブロッブにおけるエネルギー障壁を越えなければならない事を反映している。⁴また、一様磁場中の希釈イジング磁性体 (図 2.9(b)) は、ランダム磁場中のイジングモデル (RFIM) と同じユニバーサリティー・クラスに属することが明らかにされており [72]、この観点から様々な実験や数値計算が行われている [73-76]。希釈イジング磁性体においては、ドメイン壁が希釈の効果 (非磁性原子) によってピンニングされるため、この

⁴異方性をもつハイゼンベルグ磁性体は、ハイゼンベルグ磁性体とイジング磁性体の中間的な性質をもつと考える事ができ、低温になるとイジング的な性質が強く現れる [71]。

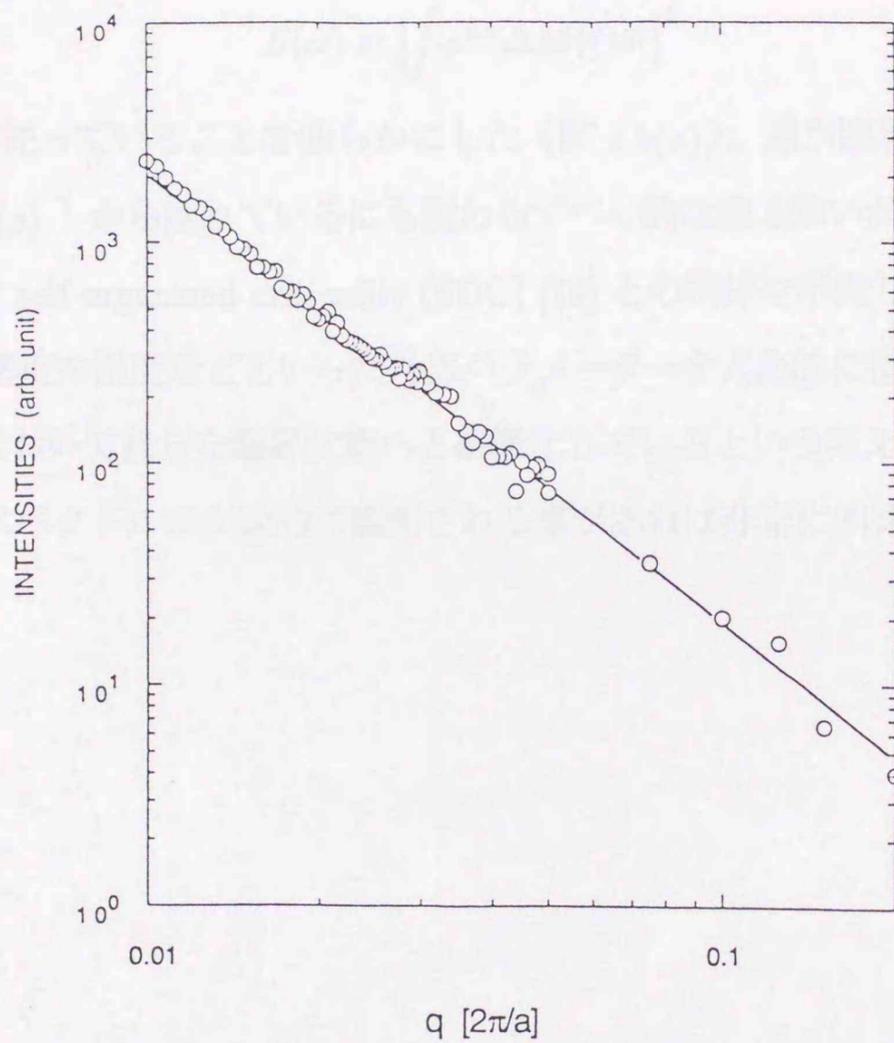


図 2. 8 $\text{Rb}_2\text{Co}_{0.60}\text{Mg}_{0.40}\text{F}_4$ に関する散乱強度の波数依存性 [69]

系における緩和現象はスローダイナミクスをしめす。Nowak と Usadel [77, 78] は、 $98 \times 98 \times 98$ という 3 次元立方格子において、 $p = 0.50$ ($p_c = 0.31$) という濃度における希釈イジング磁性体のモンテカルロ・シミュレーションを行った。その結果磁場中のドメインの構造がフラクタル的であること、また残留磁化ノイズ $\Delta M(t)$ のパワースペクトル

$$S(\omega) \equiv \left| \int e^{i\omega t} \Delta M(t) dt \right|^2 \quad (2.34)$$

が $\sim f^{-1}$ 則に従っていることを明らかにした (図 2.9(a))。系が臨界濃度 p_c (及び臨界温度 $T_N(p)$) から離れているにも関わらずべき的な振る舞いが出現する事に関して、彼らは self-organized criticality (SOC) [79] との関係を示唆している [80, 81]。SOC とは、濃度や温度などといった外部パラメーターを人為的に指定せずとも、系は時間発展において自らを臨界状態へと組織化しているという考え方である。このような f^{-1} スペクトルが実験的に観測される事があれば非常に興味深い。



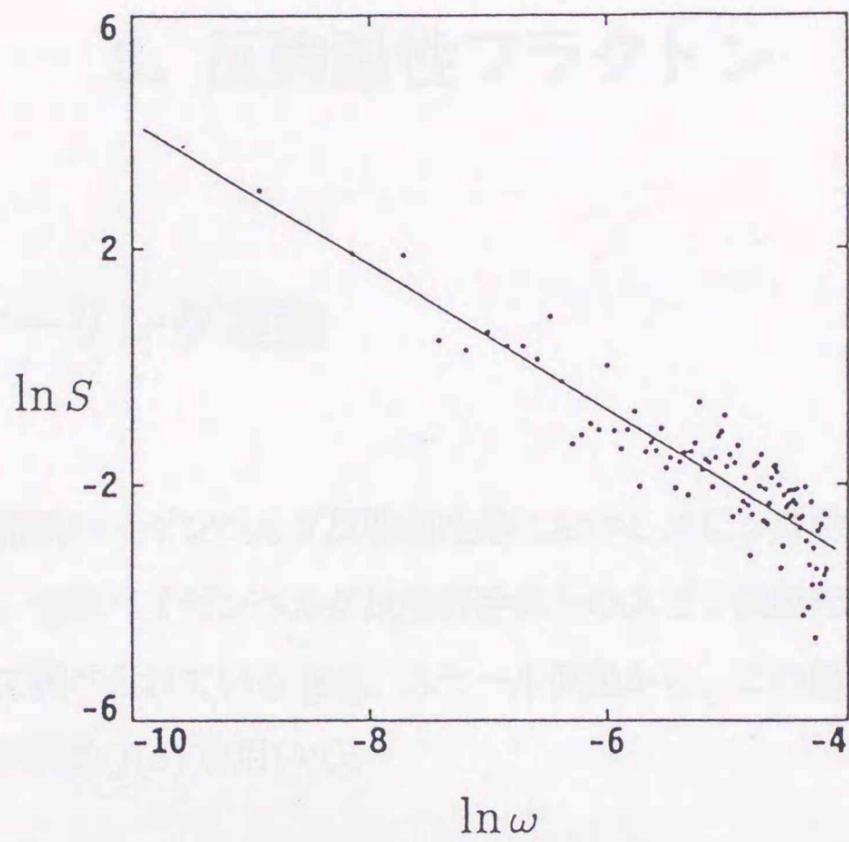


図 2. 9(a) 残留磁化ノイズのパワースペクトル [78]

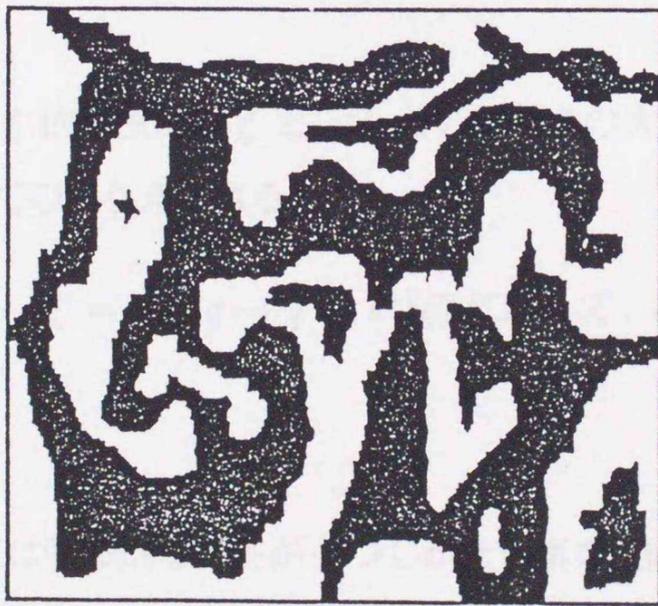


図 2. 9(b) 磁場中の希釈イジング磁性体におけるドメイン構造の概念図 [76]

3. 反強磁性フラクトン

3.1 スケーリング理論

本節では、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体におけるスピン波励起の分散関係について考察する。希釈ハイゼンベルグ反強磁性体上のスピン波励起は動的スケーリング理論によって調べられている [82]。スケール仮説から、この励起状態の分散関係はスケーリング関数 $f(x)$ を用いて、

$$\omega = q^{z_{AF}} f(q\xi) \quad (3.1)$$

と書くことができる。但し z_{AF} は動的臨界指数である。このスケーリング関数 $f(x)$ を用いた表式は、物理的には2つの事を意味している [83]。すなわち、

- (i) $\omega(q, \xi)$ の相関長 ξ 依存性は、 ξ と q^{-1} という長さの次元をもつ2つの量の“比”の関数としてのみ与えられる。
- (ii) スケール変換 ($\xi \rightarrow \xi' = b\xi$, $q \rightarrow q' = b^{-1}q$) に対して、 $\omega(q, \xi)$ はべき的に振る舞う。

(i) と (ii) は、この系には特徴的な長さが1つしかない事を反映している。(3.1) 式は、スケール仮説において物理量が(一般化された)同次関数であるとの仮定をしている事から要請される [83, 84]。すなわち一般に $\omega(q, \xi)$ は

$$\omega(q\lambda^a, \xi\lambda^b) = \lambda\omega(q, \xi) \quad (3.2)$$

(a, b は定数、 λ は任意の数) という性質をもつとする。 λ は任意なので、(3.2) で $\lambda = q^{-1/a}$ とおくと

$$\omega(1, q^{-b/a}\xi) = q^{-1/a}\omega(q, \xi) \quad (3.3)$$

ここで左辺は、事実上 ($q^{-1/a}\xi$) に関する一変数関数と見なせるので、(3.3) はある関数 $f(x)$ を用いて、

$$\omega(q, \xi) = q^{1/a}f(q^{-b/a}\xi) \quad (3.4)$$

と書き直す事ができる。ここで $a = 1/z_{AF}$ 、 $b = -1/z_{AF}$ とおいたものが (3.1) 式である。

次に、(3.1) 式における具体的なスケーリング関数 $f(x)$ の振る舞いについて述べる。まず $1/q \gg \xi$ の領域ではこの系は一様とみなせるので、スピン波励起の分散関係は通常のマグノンと同じく $\omega = C(p)q$ となる。ここで $C(p)$ は濃度 p に依存する stiffness constant である。 $1/q \ll \xi$ の領域では系はフラクタルであると思なすことができ、物理量は相関長 ξ に依存しなくなるのでスケーリング関数は $f(x) \sim \text{const.}$ となる。すなわち、スピン波励起は異常分散を示し、動的臨界指数 z_{AF} を用いて $\omega \sim q^{z_{AF}}$ となると考えられる。まとめると、スケーリング関数 $f(x)$ は、

$$f(x) \sim \begin{cases} \text{const.} & x \gg 1 \\ x^{1-z_{AF}} & x \ll 1 \end{cases} \quad (3.5)$$

と表すことができる。以上の結果から、マグノン領域 ($q\xi \ll 1$) において、

$$\begin{aligned} \omega &\propto q^{z_{AF}}(q\xi)^{1-z_{AF}} \\ &\propto \xi^{1-z_{AF}}q \end{aligned} \quad (3.6)$$

となり、 $C(p) \propto \xi^{1-z_{AF}} \propto |p - p_c|^{-\nu(1-z_{AF})}$ であることがわかる。

Harris と Kirkpatrick [67] は、長波長領域における stiffness constant $C(p)$ を、スケーリングの議論から導いた。彼らによると、stiffness constant $C(p)$ は、電気伝導

度 $\sigma(p) \sim (p - p_c)^t$ の臨界指数 t と、垂直帯磁率 $\chi_{\perp}(p) \sim |p - p_c|^{-\tau}$ の臨界指数 τ を用いて、

$$C^2(p) \propto (p - p_c)^{t+\tau} \quad (3.7)$$

となる。よって (3.6)、(3.7) 式より、

$$z_{AF} = 1 + \frac{t + \tau}{2\nu} \quad (3.8)$$

という関係式が成り立つ。さらに彼らは、垂直帯磁率に関する臨界指数 τ は他の臨界指数と関係づけられることを示した。このことは以下のようにして示すことができる [67]。

まず、Néel order からのスピンの変位と、それに伴うエネルギーの表式を、連続体近似のもとで考えてみよう。いま、up-spin sublattice の磁化を $m^a(\mathbf{r})$ 、down-spin sublattice の磁化を $m^b(\mathbf{r})$ 、各 sublattice での磁化の z 方向の大きさを M とすると、系のエネルギー E は、磁化の空間変化がゆるやかであるという仮定のもとで、

$$E = \sum_{\alpha=x,y} \int d\vec{r} \frac{A(p)}{4M^2} |\nabla m_{\alpha}^a(\vec{r}) - \nabla m_{\alpha}^b(\vec{r})|^2 + (\text{異方性などに関する項}) \quad (3.9)$$

と書ける。ここで、 $A(p)$ は exchange stiffness と呼ばれる量であり、 p_c 近傍で臨界指数 σ によって $A(p) \sim (p - p_c)^{\sigma}$ と書ける。ここで実は、この臨界指数 σ が電気伝導度に関する臨界指数 t と同じ値をとる事が知られている。そのことを以下に示す。ここで、 i サイトにおける古典的なスピンベクトルを \vec{S}_i とすると、

$$\vec{S}_i = S_i^z \left\{ (1 - \theta_i^2/2)\hat{z} + \theta_i\hat{x} \right\} \quad (3.10)$$

と書ける。但し、 \hat{z} はスピンの整列方向、 \hat{x} は \hat{z} と垂直方向の単位ベクトルであり、 θ_i はスピンの変位の大きさを表す量である ($\theta_i \ll 1$)。 S_i^z は i サイトが up-spin ないし down-spin sublattice に属するかによって各々 $S_i^z = \pm S$ という値をとる (S はスピン

の大きさ)。いま、この系には異方性も外部磁場も存在しないとすると、スピンの変位による系のエネルギーは (3.9) 式より、

$$\begin{aligned}
 E_{tot} &= J \sum_{ij} p_i p_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \\
 &= -JS^2 \sum_{ij} p_i p_j \left\{ \left(1 - \frac{\theta_i^2}{2}\right) \left(1 - \frac{\theta_j^2}{2}\right) + \theta_i \theta_j \right\} \\
 &\approx -JS^2 \sum_{ij} p_i p_j + \frac{JS^2}{2} \sum_{ij} p_i p_j (\theta_i^2 + \theta_j^2) - JS^2 \sum_{ij} p_i p_j \theta_i \theta_j \quad (3.11)
 \end{aligned}$$

但し、 p_i は i サイトが占有サイトであるとき $p_i = 1$ 、非占有サイトであるとき $p_i = 0$ である。ここで、全系のエネルギーを最小にするようなスピンの変位 $\{\theta_i\}$ は、

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta E_{tot}}{\delta \theta_i} &= JS^2 \sum_{ij} p_i p_j \theta_i \delta \theta_i - JS^2 \sum_{ij} p_i p_j \theta_j \delta \theta_i \\
 &= JS^2 \sum_i \delta \theta_i \left\{ \sum_j p_i p_j (\theta_i - \theta_j) \right\} \\
 &= 0 \quad (3.12)
 \end{aligned}$$

として求めることができる。ゆえに、 $\{\theta_i\}$ は $\sum_j p_i p_j (\theta_i - \theta_j) = 0$ を満たさねばならない。これは、 i サイトの電圧を θ_i 、 i, j サイト間のコンダクタンスを $p_i p_j$ とみなした random resistor network における Kirchoff の法則に等しい。このことから、Brenig ら [85] および Harris-Kirkpatrick [67] により、 $\sigma(p)/\sigma(1) = A(p)/A(1)$ という関係が成立することが示されている。このことから、exchange stiffness $A(p)$ は電気伝導度 $\sigma(p)$ と同様の振舞いを示し、臨界濃度 p_c 近傍で電気伝導度 $\sigma(p)$ と同じ臨界指数をもつことが分かった。

次に、体積 V 、システム・サイズが L である系を考える。この系を、一辺の長さが l であるような小さな箱に分割する。一様な系の場合、一つの箱の中の up-spin 数と down-spin 数は等しいが、希釈反強磁性体を考えている場合には、up-spin 数と down-spin 数の差は $\sim \sqrt{l^d}$ 程度であり、各箱に有限の磁化が残っていることにな

る。いま、スピンの整列している向き (z -方向) に対し垂直方向に外部磁場を印加したとする。ここで、箱の境界におけるスピンの x, y 成分はゼロであるという束縛条件を課す。このことによって、箱間の境界の影響は無視できる。ある箱 v_i における up-spin 数と down-spin 数の差を $S(v_i)$ 、スピンの変位の振幅を a_q とすると、箱のエネルギー $E(v_i)$ は、

$$\begin{aligned} E(v_i) &= (\text{交換相互作用項}) - (\text{Zeeman 項}) \\ &= C_1 l^d a_q^2 q^2 - C_2 S(v_i) a_q h_0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

と書くことができる。但し、 $q = 2\pi/l$ 、 h_0 は外部磁場の大きさ、 C_1, C_2 は定数である。(3.9) 式からわかるように、 C_1 は exchange stiffness $A(p)$ に比例している量である。ここで、交換エネルギーが右辺第一項のように表せることは、以下のようにして示せる。いま、 n サイトにおける古典的スピン・ベクトルを \vec{S}_n とし、これが (3.10) 式のように表されるとする。さらに、スピン・ベクトルの変位が (3.10) 式の表式において $\theta_r = a_q \sin(qx_n) \sin(qy_n) \sin(qz_n)$ ((x_n, y_n, z_n) は n サイトの座標) という空間依存性を示すとする。箱の境界でのサイト ($n = 0$) とその隣接サイト ($n = 1$) 間の交換エネルギーの大きさを評価すると、

$$\Delta E = J \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_1 = -JS^2 \left(1 - \frac{\theta_r^2}{2} \right) \quad (3.14)$$

となる。さらに、 qa が十分小さい場合 (a は格子間隔)、 $\theta_r \propto a_q \sin(qa) \approx a_q(qa)$ なので、

$$\Delta E \propto a_q^2 q^2 \quad (3.15)$$

が成り立つことがわかる。よって系全体では、交換エネルギーの大きさは $\sim l^d a_q^2 q^2$ というオーダーの量であることが分かる。(3.13) 式において、系の状態として実際に実現しているのは、このエネルギー $E(v_i)$ が最小になるような場合であるので、

(3.15) 式より

$$\begin{aligned}\frac{\delta E(v_i)}{\delta a_q} &= 2C_1 l^d a_q q^2 - C_2 S(v_i) h_0 \\ &= 0\end{aligned}\quad (3.16)$$

従って、

$$\begin{aligned}a_q &= \frac{C_2 S(v_i) h_0}{2C_1 l^d q^2} \\ &\propto S(v_i) l^{2-d} h_0 / A(p)\end{aligned}\quad (3.17)$$

が得られる。ここで、exchange stiffness $A(p)$ は、(3.13) 式で箱の交換エネルギー項の比例定数 C_1 が $A(p)$ に比例することによる。スピンの整列方向と垂直にかけられた外部磁場によって生ずる単位体積あたりの磁化 m_{\perp} は、

$$\begin{aligned}m_{\perp} &\propto (\text{up-spin 数} - \text{down-spin 数}) \\ &\quad \times (\text{スピン変位の大きさ}) / (\text{体積}) \\ &\propto S(v_i) \times a_q / l^d\end{aligned}\quad (3.18)$$

となり、(3.17) 式を用いると

$$m_{\perp} \propto \{S(v_i)\}^2 l^{2-2d} h_0 / A(p)\quad (3.19)$$

であり、さらに $S(v_i) \propto l^{d/2}$ より

$$m_{\perp} \propto l^{2-d} h_0 / A(p)\quad (3.20)$$

となる。以上の議論では、外部磁場に対する磁化の大きさを見積る際に、箱の境界部分でスピンの変位がゼロになっているという束縛条件を課した。しかし、この束縛条件がなければ、実際の磁化はもっと大きくなっている可能性がある。従って、

$$\begin{aligned}m_{\perp} &\geq \{S(v_i)\}^2 l^{2-2d} h_0 / A(p) \\ &\geq l^{2-d} h_0 / A(p)\end{aligned}\quad (3.21)$$

という不等式が成立する。垂直帯磁率 χ_{\perp} は $\chi_{\perp} \equiv m_{\perp}/h_0$ として与えられるので、(3.20)式より

$$\chi_{\perp} \geq \{S(v_i)\}^2 l^{2-2d}/A(p) \quad (3.22)$$

と書くことが出来る。さらに、 $\{S(v_i)\}^2$ は box 内のスピン数と同程度の大きさの量なので、

$$\begin{aligned} \{S(v_i)\}^2 &\propto P(p)l^d \\ &\propto l^d(p-p_c)^{\beta} \end{aligned} \quad (3.23)$$

よって、 $A(p) \propto (p-p_c)^{\sigma}$ 、また (3.9) 式の下で述べたように $\sigma = t$ という関係式を用いると (3.22) 式より

$$\chi_{\perp} \geq |p-p_c|^{\beta-t} l^{2-d} \quad (3.24)$$

ここで、 $l \approx \xi(\alpha |p-p_c|^{-\nu})$ とおくと、

$$|p-p_c|^{-\tau} \geq |p-p_c|^{\beta-t-\nu(2-d)} \quad (3.25)$$

となり、結局

$$\tau \geq t - \beta + (2-d)\nu \quad (3.26)$$

という臨界指数間の関係式が得られる。この結果と (3.8) 式より、動的臨界指数 z_{AF} は

$$z_{AF} \geq 1 + \frac{1}{2\nu} \{2t - \beta - (d-2)\nu\} \quad (3.27)$$

という不等式を満たす事が示された。

(3.27) 式の不等式が、実際には等式として成立するであろうという議論がある。Kumar と Harris [86] は平均場理論では不等式 (3.27) の等号が成立していること ($\tau = 0$ つまり $\chi_{\perp} \propto |\ln(p-p_c)|$) を示している。Hu ら [87] は、2次元系 (50×50) で

スピン波状態密度を数値的に求めることにより、(3.27) 式の等号成立を検証している。Ziman [68] は、3次元系における臨界指数 τ の値を数値的に求めた。Ziman は、垂直帯磁率 χ_{\perp} のシステムサイズ依存性に注目した。すなわちシステムサイズが無限大の系において濃度 p を臨界濃度近傍で変化させる（すなわち相関長 $\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$ を変える）かわりに、系のサイズ $L(\approx \xi)$ を変化させる事により、 χ_{\perp} のべき的振る舞いを数値的に調べた。それによると系のサイズを $L = 10$ から $L = 80$ まで変化させた結果、 $\tau = 0.79 \pm 0.10$ という結果を得た。すなわち誤差の範囲内で(3.27) 式では等号が成立している。

Christou ら [65] は、上記の議論に基づき、パーコレーション磁性体における強磁性スピン波励起（強磁性フラクトン）の動的臨界指数 z_F と反強磁性スピン波励起（反強磁性フラクトン）の動的臨界指数 z_{AF} の間の関係を明らかにした。すなわち、動的臨界指数 z_F は他の臨界指数を用いて

$$z_F = 2 + \frac{t - \beta}{\nu} \quad (3.28)$$

と書ける。これは(2.18) 式と同等の式である。一方 z_{AF} は、(3.27) 式においては従来の研究から等号が成立しているとする、

$$z_{AF} = 1 + \frac{1}{2\nu} \{2t - \beta - (d - 2)\nu\} \quad (3.29)$$

と書ける。よって z_F と z_{AF} の間には、

$$\begin{aligned} z_{AF} &= z_F - \frac{D_f}{2} \\ &= z_F \left(1 - \frac{\tilde{d}}{4}\right) \end{aligned} \quad (3.30)$$

という関係式が成り立つ。ここで、 $D_f = d - \beta/\nu$ および $\tilde{d} = 2D_f/z_F$ (\tilde{d} は2.2節で述べた振動フラクトンに関するフラクトン次元) という関係式を用いた [2, 18]。ここで、 \tilde{d} は系の空間次元によらずほぼ $4/3$ という値をとるという Alexander-Orbach

conjecture [18] が成立しているという条件の下で、(3.30) 式より 2 つの動的臨界指数 z_{AF} と z_F の間には

$$z_{AF} \approx \frac{2}{3} z_F \quad (3.31)$$

が成立する [65]。運動方程式が時間に関する一階の微分で記述される反強磁性スピン系の場合には、動的臨界指数 z_{AF} とフラクトン次元 \tilde{d}_{AF} は、

$$\tilde{d}_{AF} = \frac{D_F}{z_{AF}} \quad (3.32)$$

という関係にある。従って (3.31) 式は、反強磁性フラクトンのフラクトン次元 \tilde{d}_{AF} は ($\tilde{d} \approx 4/3$ より) 空間次元によらずほぼ 1 という値をとるであろうという事と同値である。次節では、スピン波状態密度の大規模数値計算を行い、状態密度の ω 依存性から直接フラクトン次元 \tilde{d}_{AF} を調べる事により、 \tilde{d}_{AF} は系の空間次元によらず 1 という値をとるという上記の理論的予想を検証する。

3. 2 状態密度および分散関係

本節では、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体のスピン波状態密度の計算結果について述べる。(線形化された) 反強磁性スピン波励起を記述する運動方程式は、 n サイトにおけるスピン変位の大きさを $S_n^+(t)$ とすると、

$$i \frac{\partial}{\partial t} S_m^+(t) = \sigma_m \sum_n J_{mn} \{ S_m^+(t) + S_n^+(t) \} \quad (3.33)$$

で与えられる [88]。但し、 σ_m は m サイトが up-spin sublattice に属するときは +1、down-spin sublattice に属するときは、-1 という値をとる。ここで、 $S/\hbar = 1$ という単位系を採用した。ここで、(2.25)、(2.26) 及び (3.33) 式を比較する事により、反

強磁性スピン波を記述する運動方程式は、マスター方程式と1対1にマッピングできない事が分かる。

具体的には d 次元 ($d = 2, 3, 4$) 正方格子上に構成された、臨界濃度における希釈ハイゼンベルグ反強磁性体上のスピン波状態密度の大規模シミュレーションを行った [89-91]。2次元系においては Mermin-Wagner の定理より、等方的な Heisenberg 磁性体には ($T > 0\text{K}$ において) 磁気的な長距離秩序が存在しない [92]。ただし現実の物質には、必ずわずかながら磁気異方性が存在する。以下、2次元系に関しては動的性質を論じる上で無視できる程度の微小な異方性が存在しており、 $p \geq p_c$ では系に長距離秩序が存在するものとする [93]。2.3 節で述べた現実の希釈反強磁性体における磁性原子の配置はサイト・パーコレーションとして記述されるが、ここではボンド・パーコレーションを用いて計算を行った。系のシステムサイズ及びサンプル数は $d = 2(p_c = 0.50)$ で 1100×1100 (1 サンプル)、 $d = 3(p_c = 0.25)$ で $100 \times 100 \times 100$ (3 サンプル)、 $d = 4(p_c = 0.16)$ で $28 \times 28 \times 28 \times 28$ (6 サンプル) で、系の境界条件は周期境界とした。実際の数値計算では、5.1 節で述べる強制振動子法を用いて行った。計算結果を図 3.1 に示す。 $d = 3, 4$ に関する結果は、各サンプルに対して状態密度を求めた上で、アンサンプル平均をとったものである。図中で、黒い四角が 2次元系、三角が 3次元系、黒丸が 4次元系の結果に各々対応している。これらの状態密度の計算結果から、フラクトン次元の値を解析した結果、2次元系で $\tilde{d}_{AF} = 0.99 \pm 0.04$ 、3次元系で $\tilde{d}_{AF} = 0.98 \pm 0.04$ 、4次元系で $\tilde{d}_{AF} = 0.98 \pm 0.04$ という結果が得られた [90, 91]。上記の結果は、反強磁性フラクトンのフラクトン次元 \tilde{d}_{AF} は、系の空間次元によらずほぼ 1 であるという、3.1 節で述べたスケーリング理論の予想と一致している。次に、 $p = 0.56 (> p_c)$ におけるパーコレーション反強磁性体の状態密度を調べた。この系では相関長 ξ が有限であり、クロスオーバー・エネルギー ω_c においてマグノン・フラクトン・クロスオーバーが存在すると考えら

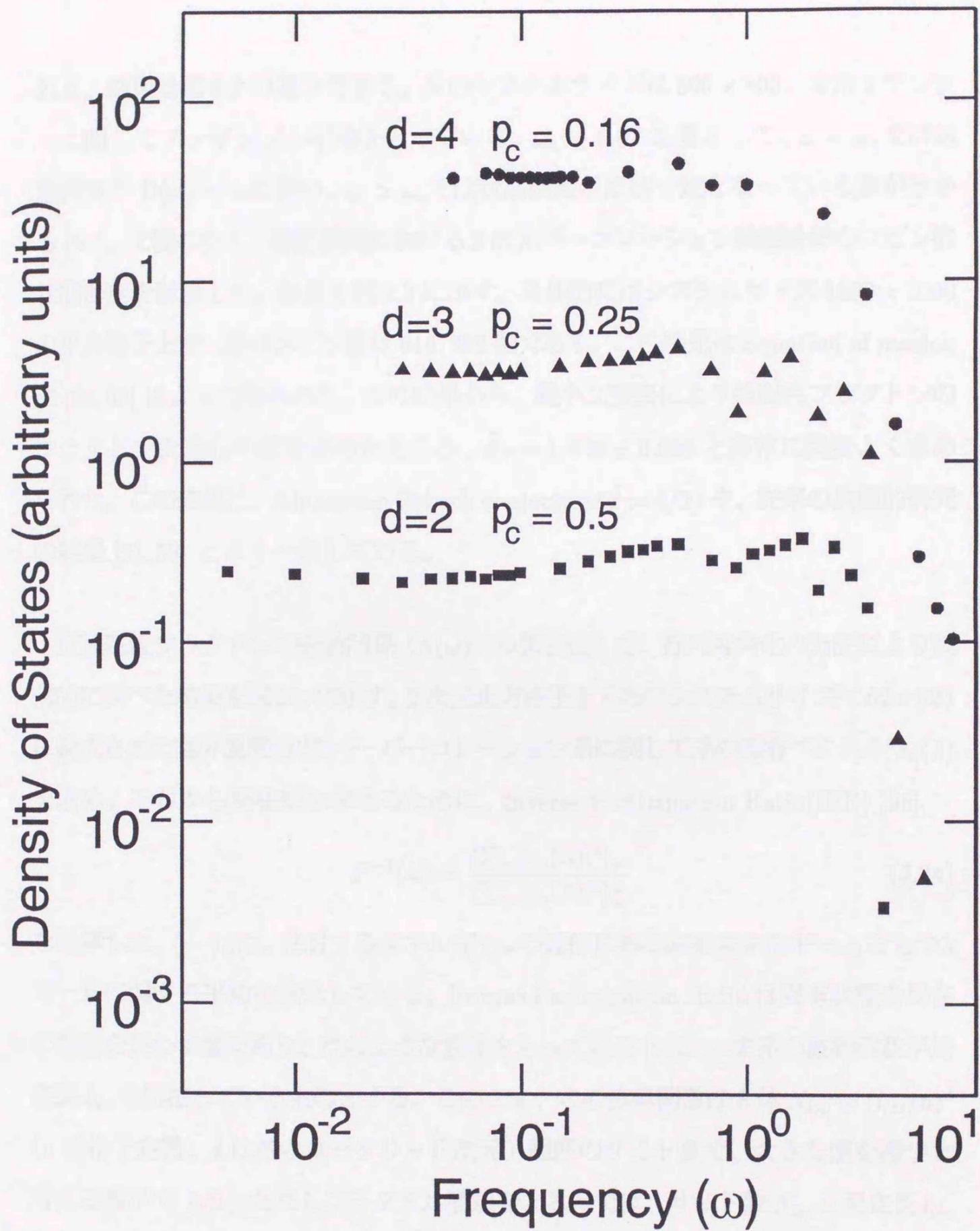


図3.1 パーコレーション反強磁性体 ($p = p_c$) のスピン波励起に関する状態密度 [91]

れる。結果は図3.2の通りである。系のシステムサイズは 800×800 、また2サンプルに関してアンサンブル平均をとっている。 $\omega_c \sim 0.07$ を境として、 $\omega < \omega_c$ では状態密度が $\mathcal{D}(\omega) \sim \omega$ に従い、 $\omega > \omega_c$ では状態密度がほぼ一定となっている事が分かる [91]。比較のため、臨界濃度における2次元パーコレーション強磁性体のスピン波状態密度を計算した。結果を図3.3に示す。具体的にはシステムサイズ 1000×1000 の正方格子上で、系のスピン数は615,382個である。この結果はEquation of motion法 [94,95] によって得られた。この結果から、最小二乗法により強磁性フラクトンのフラクトン次元 \tilde{d}_F の値を求めたところ、 $\tilde{d}_F = 1.328 \pm 0.006$ と非常に精度よく求められた。この結果は、Alexander-Orbach conjecture ($\tilde{d} = 4/3$) や、従来の数値的研究の結果 [51,53] とよく一致している。

反強磁性フラクトンの分散関係 ($\Lambda(\omega)$ の ω 依存性) を、行列対角化の方法により数値的に調べた結果を図3.4に示す。2次元正方格子上 (系のシステムサイズは 62×62) に構成された臨界濃度のボンド・パーコレーション系に関して系の固有ベクトル⁵ $s_n(\lambda)$ を求め、それから局在長を求めるために、Inverse Participation Ratio (IPR) [96]

$$P^{-1}(\omega) = \frac{\langle \sum_n |s_n(\lambda)|^4 \rangle_\omega}{\langle \sum_n |s_n(\lambda)|^2 \rangle_\omega^2} \quad (3.34)$$

を計算した。 $\langle \dots \rangle_\omega$ は、注目するエネルギー ω の近傍にある固有エネルギー ω_λ をもつ λ モードに関する平均を意味している。Inverse Participation Ratio は固有状態の局在の程度を表わす量であり、次のような意味をもっている [96]。いま系の波動関数が局在長 l_{loc} で局在しているものとする。このとき、この波動関数は大体 $N_{loc} \sim (l_{loc}/a)^d$ (a は格子定数、 d は系のユークリッド次元) 程度のサイト数で、大きな値を持つと考える事ができる。ただしフラクタル構造をとる系では、サイト数 N_{loc} と局在長 l_{loc} の間の関係式はフラクタル次元 D_f を用いて $N_{loc} \sim (l_{loc}/a)^{D_f}$ と書ける。ここでこの N_{loc} 個のサイトにおいては、波動関数の振幅が一定の値 ($\approx 1/\sqrt{N_{loc}}$) をとると近

⁵正確には、ダイナミカル・マトリックスの右固有ベクトルである。5.1節を参照

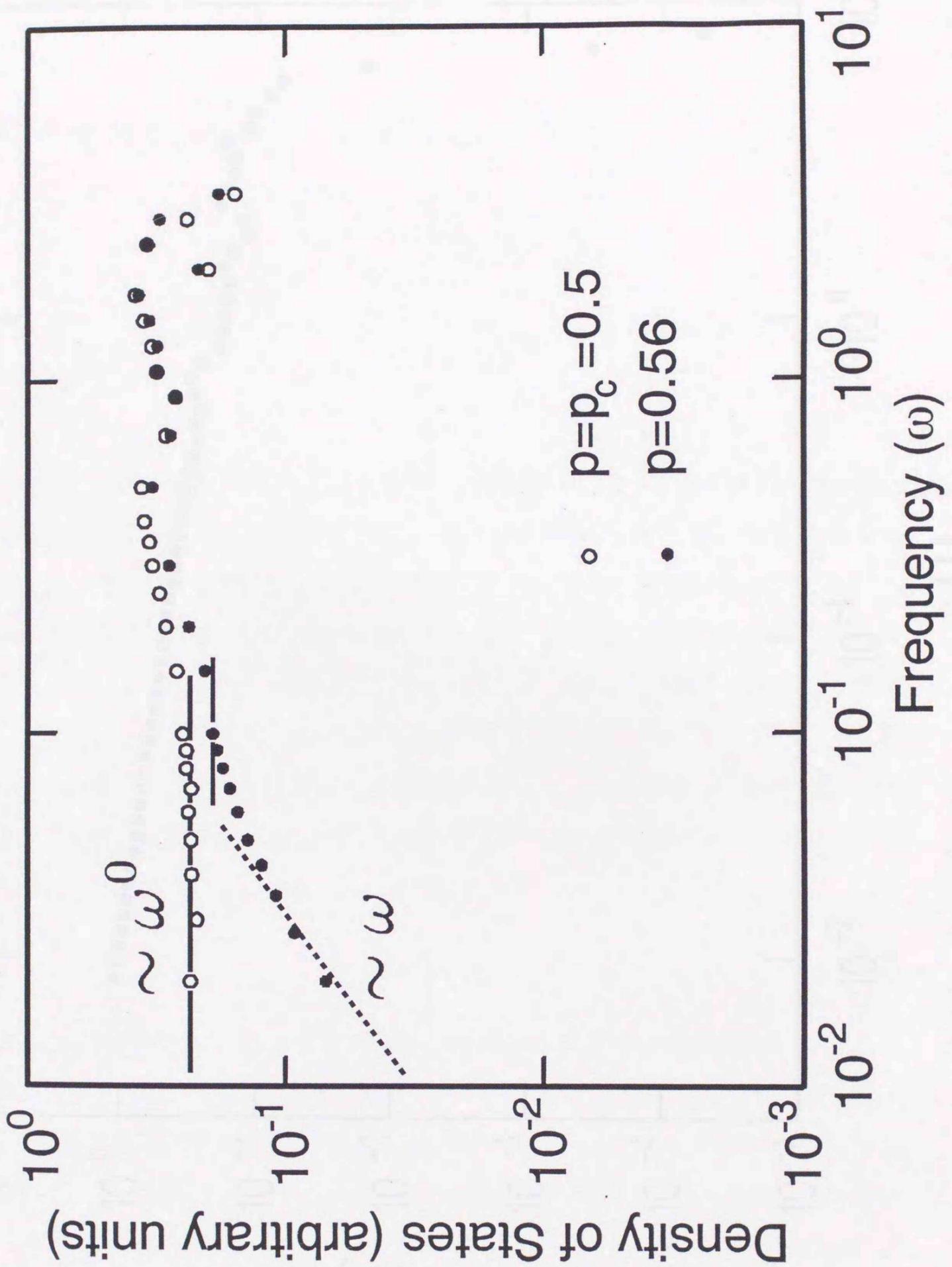


図3.2 パーコレーション反強磁性体 ($p > p_c$) の状態密度 [91]

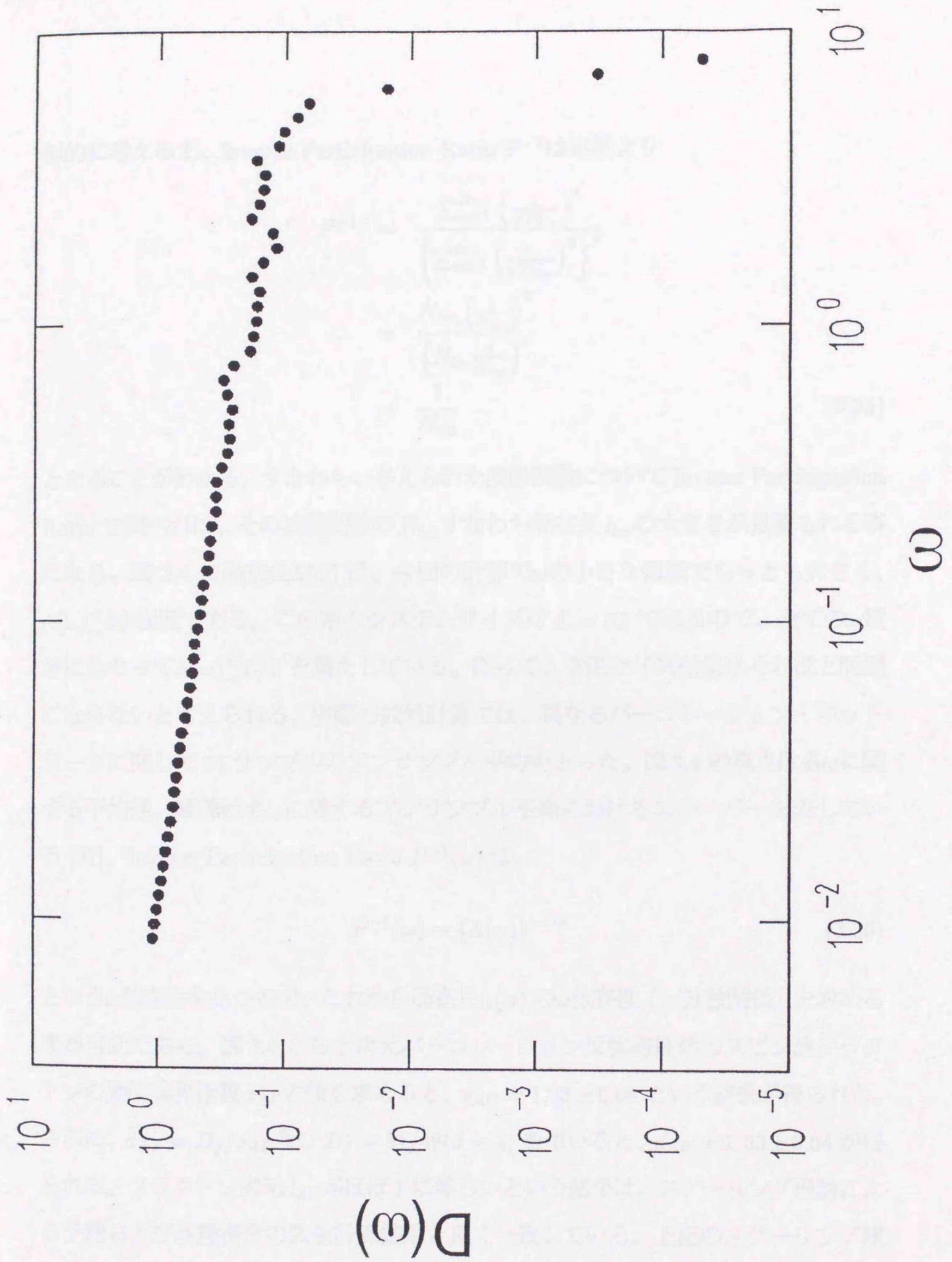


図3.3 パーコレーション強磁性体 ($p = p_c$) の状態密度

似的に考えると、Inverse Participation Ratio P^{-1} は定義より

$$\begin{aligned}
 P^{-1} &= \frac{\sum_{n=1}^{N_{loc}} \left(\frac{1}{\sqrt{N_{loc}}}\right)^4}{\left\{\sum_{n=1}^{N_{loc}} \left(\frac{1}{\sqrt{N_{loc}}}\right)^2\right\}^2} \\
 &= \frac{N_{loc} \left(\frac{1}{N_{loc}}\right)^2}{\left(N_{loc} \frac{1}{N_{loc}}\right)^2} \\
 &= \frac{1}{N_{loc}} \tag{3.35}
 \end{aligned}$$

となることがわかる。すなわち、与えられた波動関数について Inverse Participation Ratio を調べれば、その波動関数の N_{loc} すなわち局在長 l_{loc} の大きさが見積もれることになる。図 3.4 で局在長 $\Lambda(\omega)$ は、今回の計算で ω の小さな領域でもっとも大きく、 $\Lambda(\omega) \lesssim 30$ 程度である。この系のシステムサイズは $L = 62$ であるので、全ての ω 領域にわたって $\Lambda(\omega) \lesssim L/2$ を満たしている。従って、有限サイズ効果はそれほど問題にならないと考えられる。実際の数値計算では、異なるパーコレーション・ネットワークに関して 54 サンプルのアンサンブル平均をとった。図 3.4 の黒丸は各 ω に関する平均値、縦棒は各 ω に関するアンサンブル平均におけるエラーバーを表している [97]。Inverse Participation Ratio $P^{-1}(\omega)$ は、

$$P^{-1}(\omega) \sim \{\Lambda(\omega)\}^{-D_f} \tag{3.36}$$

という ω 依存性をもつので、これから局在長 $\Lambda(\omega)$ の ω 依存性 (=分散関係) を求める事が可能である。図 3.4 から 2 次元パーコレーション反強磁性体のスピン波フラクトンの動的臨界指数 z_{AF} の値を求めると、 $z_{AF} = 1.83 \pm 0.08$ という結果が得られた。さらに、 $\tilde{d}_{AF} = D_f/z_{AF}$ 及び $D_f = 91/48 (d=2)$ を用いると、 $\tilde{d}_{AF} = 1.03 \pm 0.04$ が得られる。フラクトン次元 \tilde{d}_{AF} がほぼ 1 に等しいという結果は、スケーリング理論による予想および状態密度の数値計算結果と良く一致している。上記のスケーリング理論及び数値シミュレーションから、反強磁性フラクトンのフラクトン次元 ($\tilde{d}_{AF} \approx 1$)

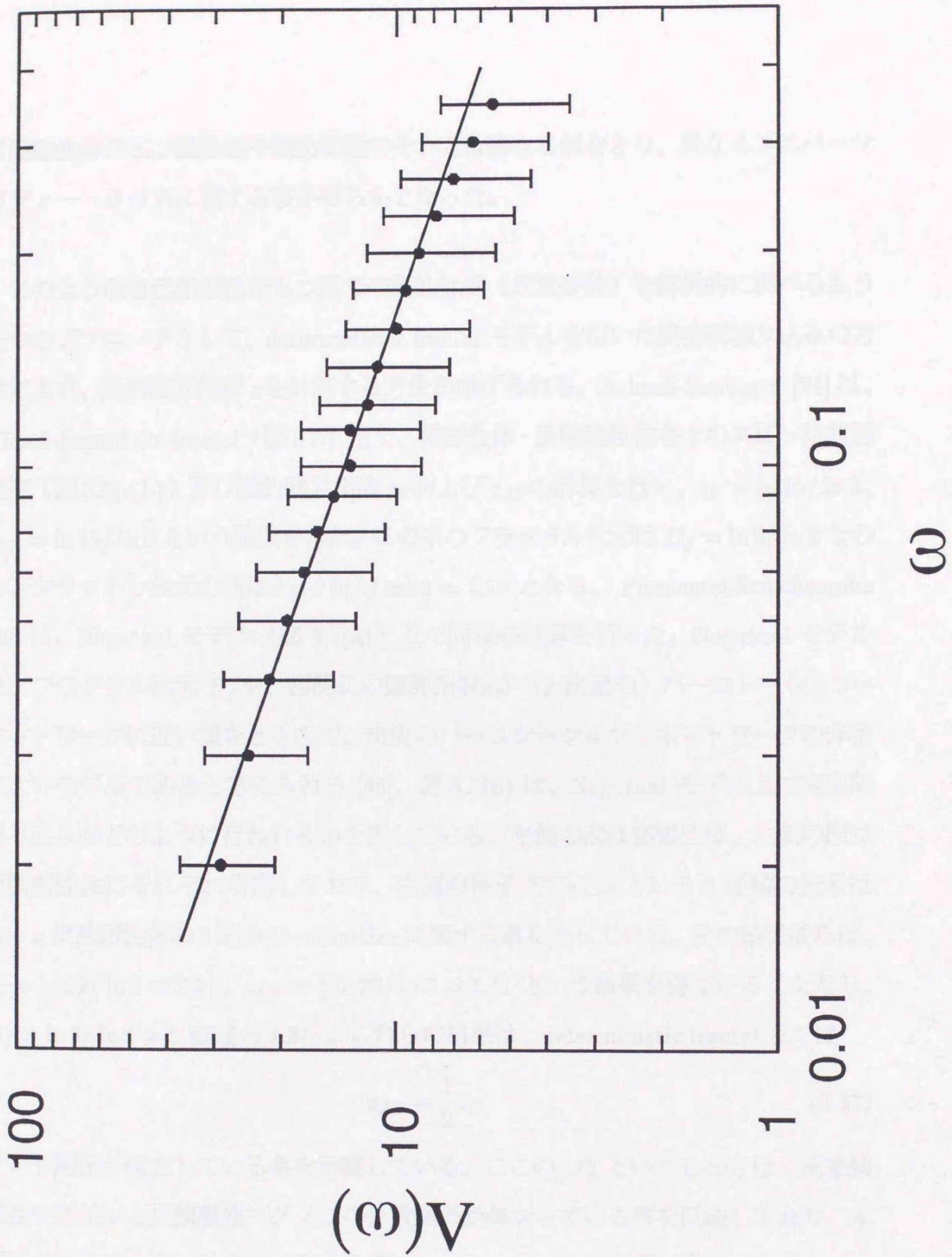


図3.4 反強磁性フラクトンの分散関係 [97]

は強磁性体スピン波励起や振動問題のそれとは異なる値をとり、異なるユニバーサリティー・クラスに属する事が明らかとなった。

このような自己相似性をもつ系での動的性質（異常分散）を解析的に調べるもう一つのアプローチとして、deterministic fractal モデルを用いた実空間繰り込みの方法により、動的臨界指数 z を計算する方法が挙げられる。Ashraff-Southern [24] は、Vicsek-Snowflake fractal (図 3.5) 上で、強磁性体・反強磁性体各々のスピン波状態密度 (図 3.6(a,b)) 及び動的臨界指数 z_F および z_{AF} の計算を行い、 $z_F = \ln 15 / \ln 3$ 、 $z_{AF} = \ln 15 / \ln 9$ という結果を得た。この系のフラクタル次元は $D_f = \ln 5 / \ln 3$ なので、フラクトン次元の値は $\tilde{d} = 2 \ln 5 / \ln 15 \approx 1.19$ となる。Piementel-Stinchcombe [25] は、Nagatani モデル (図 3.7(a)) 上で同様の計算を行った。Nagatani モデルは、フラクタル次元 D_f や、相関長の臨界指数 ν が (2次元の) パーコレーション・ネットワークに近い値をとるので、現実のパーコレーション・ネットワークの非常によいモデルであると考えられる [98]。図 3.7(b) は、Nagatani モデル上で実空間繰り込みがどのように行われるかを表している。左側の図は強磁性体、右側の図は反強磁性体にそれぞれ対応しており、右側の格子点で \bullet と \times という 2 種類の記号は各々、反強磁性体の 2 通りの sublattice に属する事を表している。その結果彼らは、 $z_F = \ln 22 / \ln 3 \approx 2.81$ 、 $z_{AF} = \frac{1}{2} \ln 22 / \ln 3 \approx 1.41$ という結果を得ている (ただし、 $D_f = \ln 8 / \ln 3 \approx 1.89$ 、 $\tilde{d} \approx 1.34$)。これらの結果は、deterministic fractal 上では

$$z_{AF} = \frac{1}{2} z_F \quad (3.37)$$

という関係が成立している事を示唆している。ここの $1/2$ という factor は、元来強磁性マグノンと反強磁性マグノンの分散関係が異なっている事を反映しており、本質的ではない。この結果は上記の数値シミュレーションの結果 ($\tilde{d} \approx 4/3$ 、 $\tilde{d}_{AF} \approx 1$ 故に $\tilde{d} \neq \tilde{d}_{AF}$) とは異なっている。このことから、強磁性フラクトンと反強磁性フラクトンのユニバーサリティークラスが異なるという事実は、系のランダムネス、具

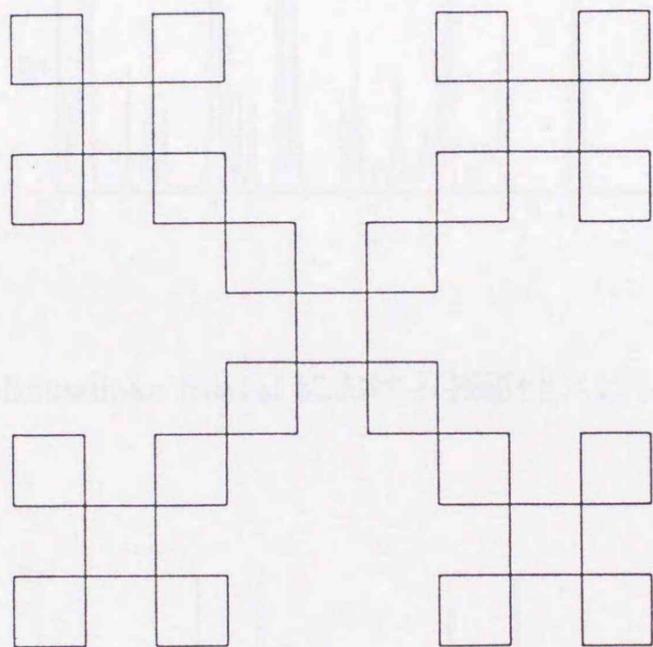


图 3.5 Vicsek-Snowflake fractal [24]

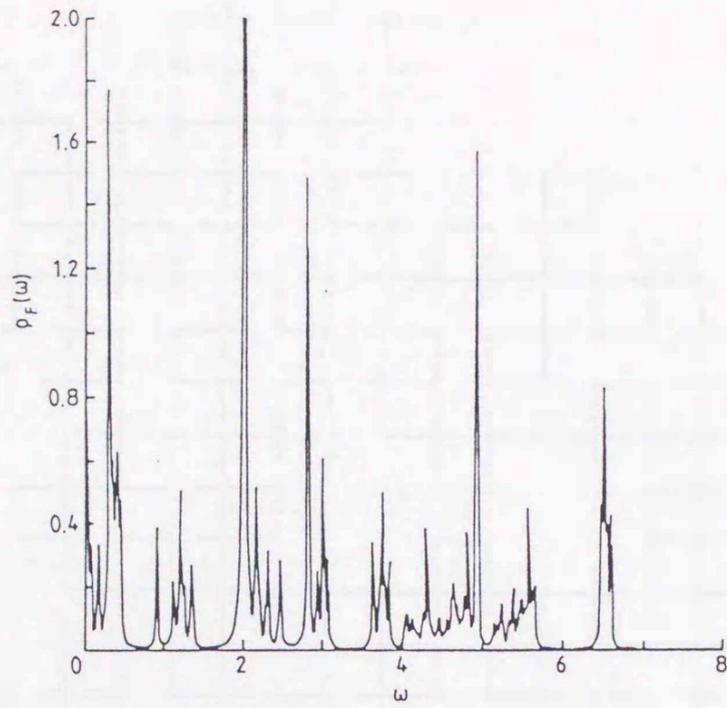


図 3. 6(a) Vicsek-Snowflake fractal における強磁性スピン波励起の状態密度

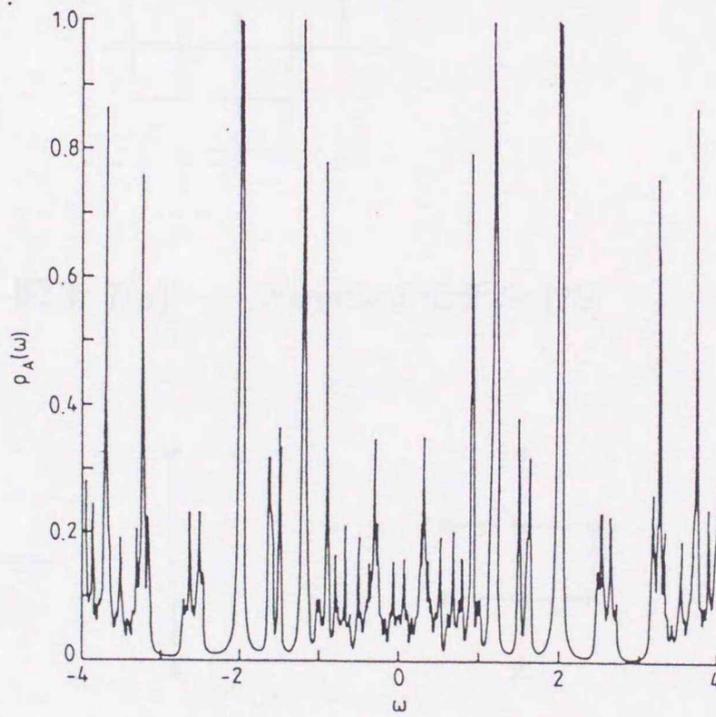


図 3. 6(b) Vicsek-Snowflake fractal における反強磁性スピン波励起の状態密度

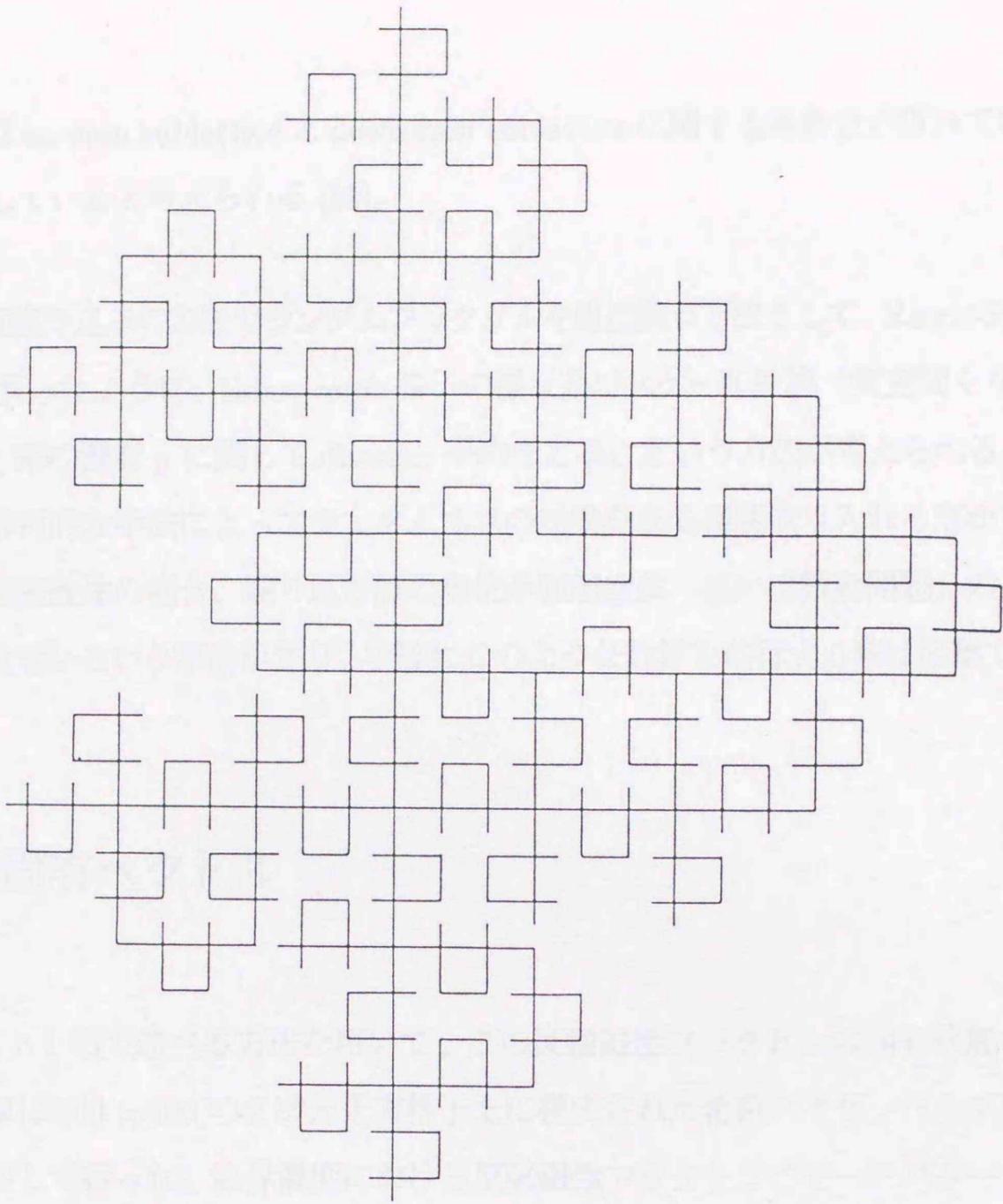


図 3. 7(a) Nagatani モデル [25]

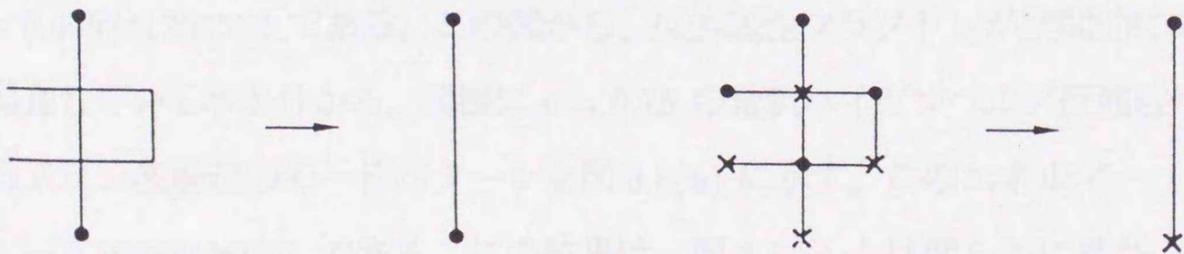


図 3. 7(b) Nagatani モデルにおける実空間繰り込みの手順 [25]

体的には up-spin sublattice と down-spin sublattice に関する対称性が破れている事を反映していると考えられる [99]。

実空間繰り込みの方法でランダムフラクタルを直接扱う方法として、Harris-Stinchcombe [100] が行ったように、Honeycomb 格子の様な系でスケール変換（実空間くり込み）を行い、系の濃度 p に関して disorder 平均をとる、という方法が考えられる。このような解析的な手法によってランダムネスの効果がある程度取り入れる事が可能だが、反強磁性体の場合、繰り込む際の単位が強磁性体（或いは振動問題）のそれに比べて大きいという事情があり、実際にこのような計算を遂行する事は困難である。

3.3 固有ベクトル

次に、5.1 節で述べる方法を用いて、この反強磁性フラクTONの固有状態を調べた。計算は 100×100 の2次元正方格子に構成された希釈ハイゼンベルグ反強磁性体に対して行った。臨界濃度における反強磁性フラクTONのモードパターンを図 3.8(a) に示す。各サイトにおける矢印の大きさが、スピン変位 S_n^+ の振幅に対応している。図中で、スピン変位 S_n^+ の振幅がある値よりも小さなサイトに関しては矢印を表示していない。この得られた反強磁性フラクTONのエネルギー（固有値）は $\tilde{\omega} = 0.049341266562$ である。この図から、反強磁性フラクTONが空間的に非常に強く局在している事が分かる。同様に $p = 0.75$ の希釈ハイゼンベルグ反強磁性体におけるスピン波励起のモードパターンを図 3.8(b) に示す。このエネルギー（固有値）は $\tilde{\omega} = 0.10088438973$ である。この結果は、図 3.8(a) とは明らかに異なっており、スピン波は系全体に広がったマグノンである事が分かる。

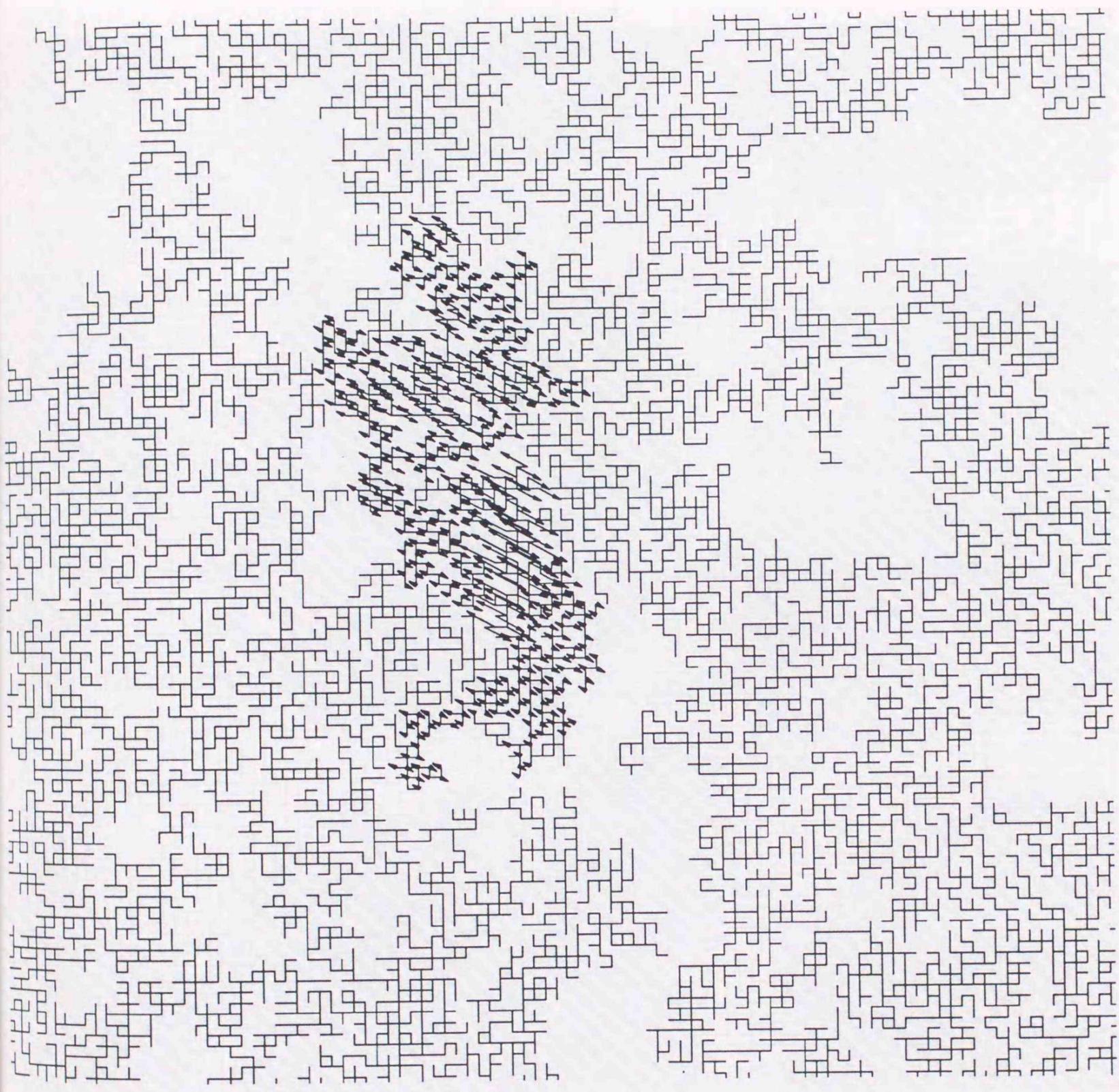


図 3. 8(a) 反強磁性フラクトンのモードパターン

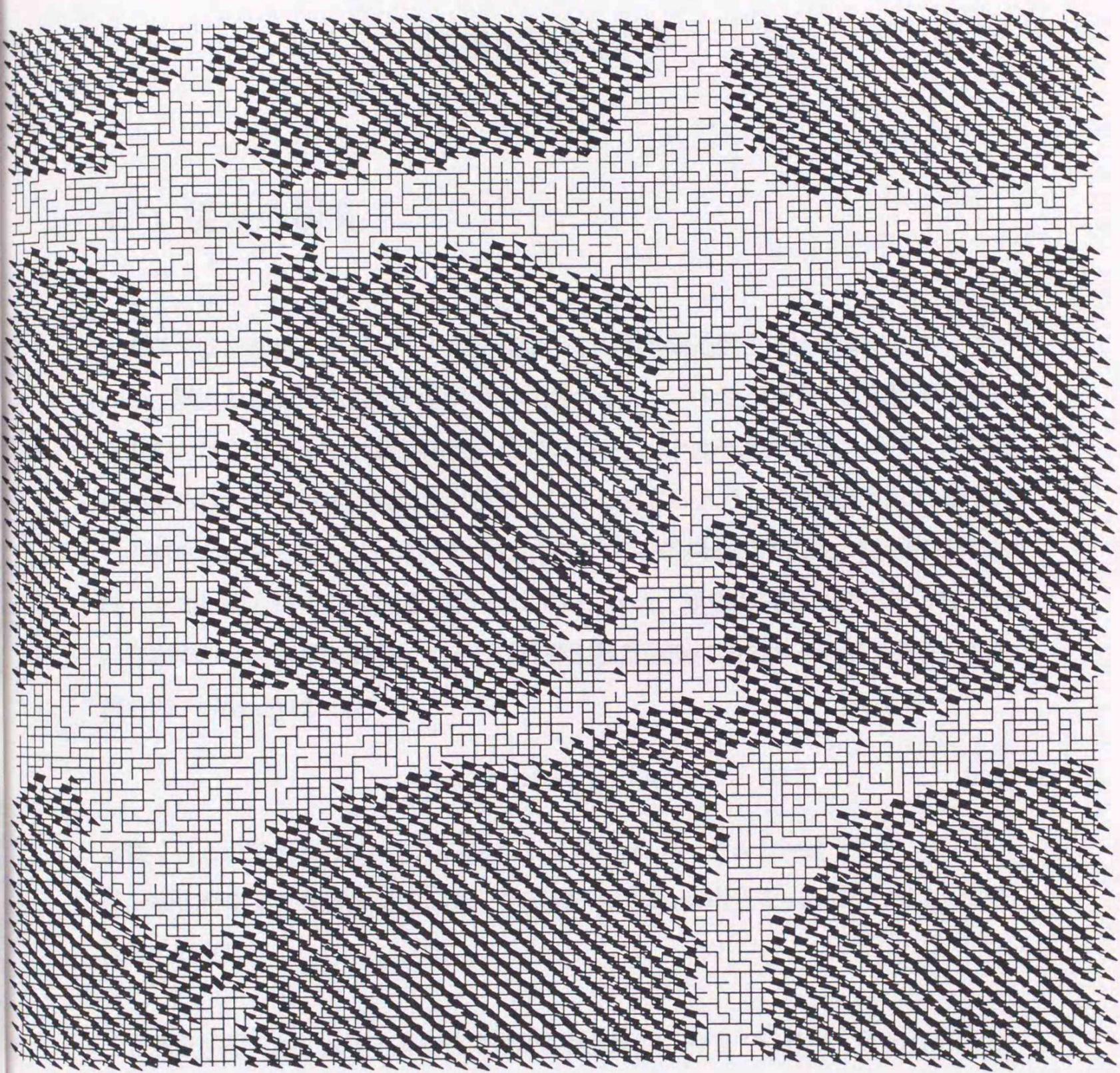


図 3. 8(b) 反強磁性マグノンのモードパターン

第4章 希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の 動的構造因子

4.1 従来の研究

本章では、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的構造因子の振る舞いについて述べる。現実の希釈反強磁性体を実験的に調べる上で、中性子非弾性散乱実験は重要な役割をはたしている。動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ は、中性子非弾性散乱強度と直接関係のある量であり、実験結果を解釈ないしは予言する上で、動的構造因子の振る舞いを明らかにすることが不可欠である。磁性体の動的構造因子には、磁化容易軸 (z 軸) 方向に対して平行な成分に関する $S^{\parallel}(\mathbf{q}, \omega)$ と、垂直な成分に関する $S^{\perp}(\mathbf{q}, \omega)$ が存在するが、本章で問題とするのは非弾性散乱強度に関与する後者である。動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ は一般に、

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \langle n+1 \rangle \chi''(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.1)$$

と書くことができる [101]。ここで、 $\langle n+1 \rangle$ は Bose 因子 ($= (1 - e^{-\beta\omega})^{-1}$)、 $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ は一般化帯磁率の虚部である。以下の議論では、Bose 因子を reduce しても一般性は失われない。

希釈反強磁性体に対する非弾性中性子散乱実験は、今までに数多く行われている。Dietrich ら [57] は、 $\text{Mn}_{0.68}\text{Zn}_{0.32}\text{F}_2$ の zone boundary ($\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\text{ZB}}$) における $S(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性すなわちエネルギースペクトルを調べている。Svensson ら [58] は、より臨界濃度 ($p_c = 0.25$) に近い $\text{Mn}_{0.32}\text{Zn}_{0.68}\text{F}_2$ の中性子非弾性散乱実験を行っている。そ

の結果彼らは、Buyers ら [102, 103] による理論計算や、Holcomb-Harris [104] による計算機実験と比較的よく一致したとしている。Coombs ら [59] は、 $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ ($x = 0.78, 0.32$) に関する実験を、様々な波数ベクトル \mathbf{q} に関して調べている。それによると、 $p = 0.78$ においては波数ベクトルを大きくするにつれてピーク幅は大きくなるが、zone boundary においてもピーク幅はピーク位置のエネルギーに比べて小さいので、ブリルアンゾーン全体でスピン波（マグノン）が存在すると主張している。それに対し、 $p = 0.32$ では極めてピーク幅は広く、系全体に広がっているスピン波の存在は認められなかったとしている。Cowley ら [105] は、2次元の希釈ハイゼンベルグ反強磁性体 $\text{RbMn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ ($x = 1.00, 0.57, 0.54$) に関する中性子散乱実験を行っている。これらは、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体に関する実験としては初期のものであるが、動的構造因子に関する詳細な情報を明らかにするには至らなかった。

近年、これらの物質に対してより高解像度の実験が行われている。Uemura と Birgeneau [33, 34] は、 $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ ($x = 0.50, 0.75$) に関する中性子散乱実験を行った。彼らは、 $\sim 8\text{cm}^3$ という大きな単結晶を用いて、ブリルアンゾーン全領域におけるエネルギー・ギャップを調べている。 MnF_2 において Mn^{2+} のスピンは c 軸方向に整列しており、dipole interaction に基づく弱いイジング異方性の効果によって低エネルギー側のスピン波励起にエネルギー・ギャップが存在する。規則系 (MnF_2 , $p = 1$) でのマグノンの最大エネルギーは、 $\approx 6.5\text{meV}$ 、また異方性に基づくスピン波励起のエネルギー・ギャップの大きさは 1.08meV である。彼らの実験結果を次に示す (図 4.1)。この系では、 $h = 0$ が zone center、 $h = 0.5$ が zone boundary にそれぞれ対応する。図 4.1 の中で、 $h = 0$ におけるピーク位置が $E = 0.3\text{meV}$ にあるのは、この系に異方性があること、また異方性に基づくエネルギー・ギャップが希釈の効果によって小さくなっている事を反映している。 $h = 0.05, 0.1$ においては、高エネルギー側

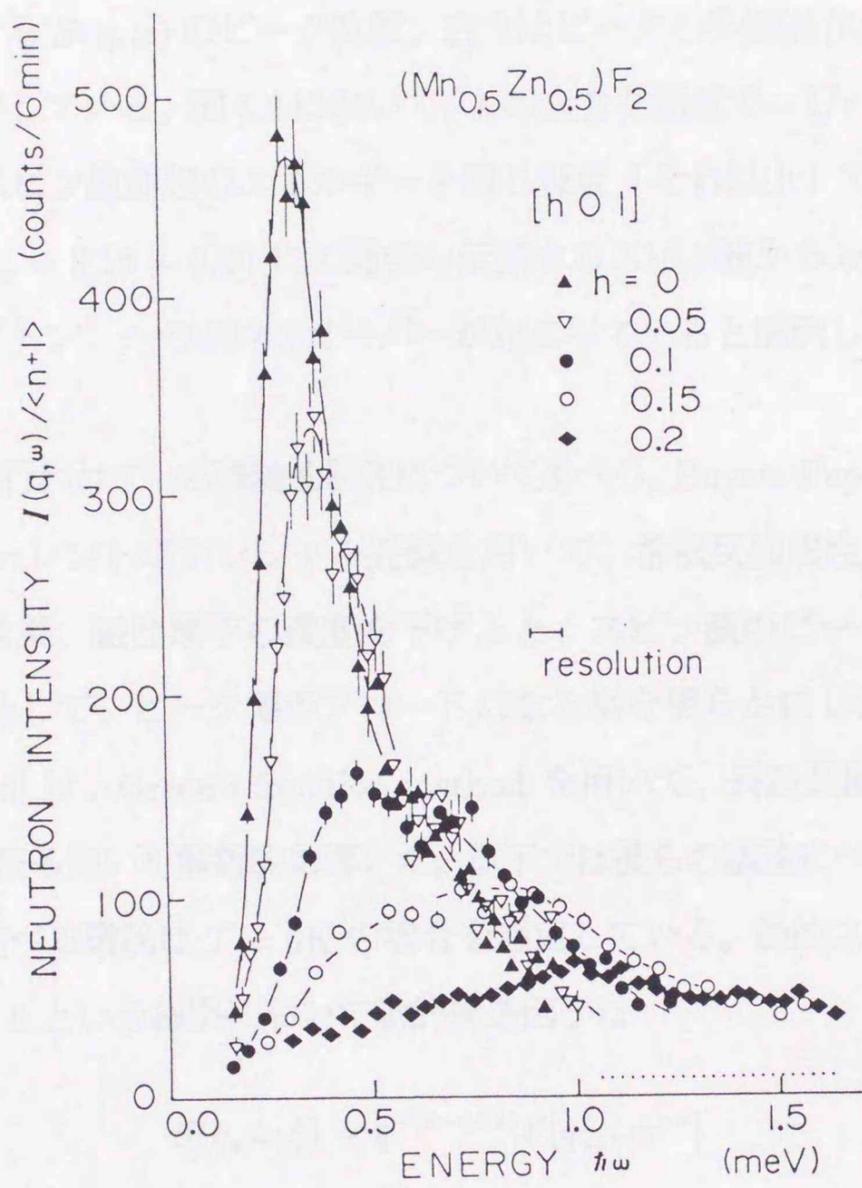


図 4. 1 $\text{Mn}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{F}_2$ における中性子非弾性散乱実験 [34]

に長い tail を引いている左右非対称な鋭いピークが現れている。波数ベクトルが大きくなると、ピーク位置は高エネルギー側に移動している。それにつれて、ピーク幅が急速にブロードになっており、ピークの強度自体も顕著に減少している。図 4.1 で観測された結果を解析したのが図 4.2 である。図中で黒丸は、スピン波励起の分散関係に対応する $S(\mathbf{q}, \omega)$ のピーク位置、白丸はピークの半値幅 (full width at half maximum) を表している。図 4.2 において、 h の大きな領域で $\sim 1/\tau$ に相当するピークの半値幅がスピン波励起のエネルギーと同じ程度 (それ以上) であることから、Uemura らは $h_{co} = 0.15 \sim 0.20$ にて通常の伝搬するスピン波から overdamp した励起状態 (フラクトン) へのクロスオーバーが起こっていると解釈した。

次に今までに行われている理論的研究について述べる。Buyers-Pepper-Elliott [102, 103] は、コヒーレントポテンシャル近似を用いて、希釈反強磁性体の $S(\mathbf{q}, \omega)$ を調べた。その結果、磁性原子の濃度を下げると、スピン波のピーク位置が低エネルギー側に移動して、ピーク幅がブロードになる事を明らかにした。Christou と Stinchcombe [65] は、Green's function method を用いて、長波長極限 $q\xi \ll 1$ における $S(q, \omega)$ の振る舞いを解析的に導いた。以下では彼らの議論について述べる。ただし、ここで述べる議論は $T = 0\text{K}$ の場合を想定している。動的スケーリング仮説より、 $q, \xi^{-1} \rightarrow 0$ という極限において動的構造因子は

$$S(q, \omega; \xi) = q^{-(2-\eta+z)} F[q\xi, \omega q^{-z}] \quad (4.2)$$

(z は動的臨界指数、 η は $S(q, \omega; \xi)$ を特徴づける指数) というスケーリング形式に従う事が期待される。このときピーク位置 ω_c とピーク幅 Γ_c という2つの特徴的な量は (4.2) 式よりスケーリング関数 $f(x), g(x)$ を用いて各々

$$\omega_c = q^z f(q\xi) \quad (4.3)$$

$$\Gamma_c = q^z g(q\xi) \quad (4.4)$$

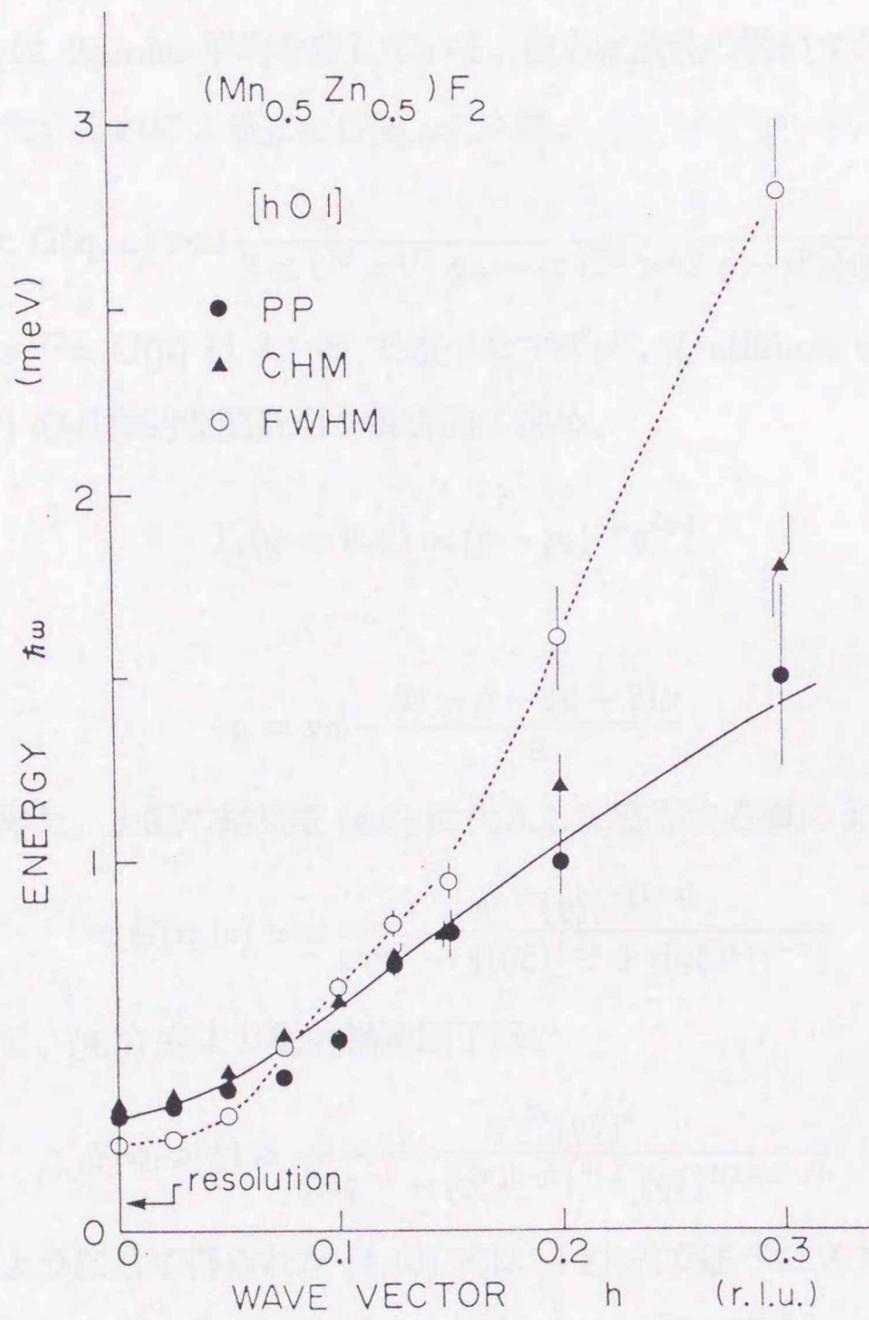


図 4.2 $\text{Mn}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{F}_2$ における分散関係 [34]

と表される。ここで(4.3)は(3.1)式と全く同じものである。具体的に動的相関関数 $S(\mathbf{q}, \omega; \xi)$ は、Green 関数の虚数部分と関係づけられる。すなわち、

$$S(\mathbf{q}, \omega; \xi) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im} \langle G(\mathbf{q}, \omega + i\epsilon) \rangle \quad (4.5)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は disorder 平均を表している。彼らは散乱の弱いマグノン領域 ($q\xi \rightarrow 0$) を取り扱った。それによると $\langle G(\mathbf{q}, \omega) \rangle$ は、

$$\langle G(\mathbf{q}, \omega) \rangle \approx \frac{1}{2 \langle C^2 \rangle^{1/2} q \omega - \langle C^2 \rangle^{1/2} q - i\Gamma_c(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.6)$$

ただし $\langle C^2 \rangle^{1/2} = C(p)$ は 3.1 節 で述べたマグノンの stiffness constant である。彼らは $\Gamma_c(\mathbf{q}, \xi)$ の具体的な関数形を解析的に求め、

$$\Gamma_c(q \rightarrow 0, \xi) \propto (p - p_c)^{-\mu} q^{d+1} \quad (4.7)$$

但し

$$\mu = \nu d - \frac{2t - \beta - (d-2)\nu}{2} \quad (4.8)$$

という結果を得た。上記の結果を(4.6)に代入して整理する事により

$$\langle G(\mathbf{q}, \omega) \rangle \approx \frac{q^{-2z} (q\xi)^{-(1-z)}}{\omega q^{-z} - \{(q\xi)^{1-z} + i(q\xi)^{1+d-z}\}} \quad (4.9)$$

となる。従って、(4.5)式より動的構造因子は、

$$S(\mathbf{q}, \omega; \xi) \approx \frac{q^{-2z} (q\xi)^d}{\{\omega q^{-z} - (q\xi)^{1-z}\}^2 + (q\xi)^{2(1+d-z)}} \quad (4.10)$$

となる。このようにして得られた(4.10)式は(4.2)式で述べたスケーリング形式を満たしている。しかし彼らの議論においては、フラクトン領域 $q\xi \gg 1$ に関する動的構造因子の振る舞いに関しては言及していない。

Polatsek ら [23] は有効媒質近似 (EMA) を用いて、等方的なハイゼンベルグ型のパーコレーション反強磁性体における $S(\mathbf{q}, \omega)$ について調べた。その内容について

以下に述べる。EMA では、一本の特別なボンド (1-2 ボンド) J_{12} を除くすべての最近接相互作用を、effective coupling $W(\omega)$ で置き換える。そして、 $W(\omega)$ の ω 依存性を self-consistent 方程式を解くことにより求める [106, 107]。このとき、全系のハミルトニアンは、系全体で一様な effective coupling $W(\omega)$ をもつ無摂動系 \mathcal{H}_0 と、1-2 ボンドにおける交換相互作用を有効媒質 $W(\omega)$ から J_{12} に置き換えた事によって生ずる摂動 V の和として書ける。このような系の Green 関数を g^R とする。また、無摂動系すなわち (1-2 ボンドを含む) 系全体の最近接相互作用が effective coupling $W(\omega)$ であるとしたときの Green 関数を G^R とする。このとき、 g^R と G^R の関係は、

$$g^R = G^R + G^R T G^R \quad (4.11)$$

と書ける。ここで、 T は 1-2 ボンドに関する散乱の T-matrix であり、一般に

$$\begin{aligned} T &= V + V G^R T \\ &= V(1 - G^R V)^{-1} \end{aligned} \quad (4.12)$$

となる。ここで、T-matrix の平均 $\langle T \rangle = 0$ という条件式を課すと、 $\langle g^R \rangle = G^R$ となる。ここで $\langle \dots \rangle$ は、系の disorder に関する平均である。すなわち J_{12} ボンドによる散乱の効果が有効媒質 $W(\omega)$ においては平均してゼロになるという条件の下で、有効媒質 $W(\omega) = W'(\omega) + iW''(\omega)$ を求める事ができる。いいかえると、1-2 ボンドにおける交換相互作用が、確率 p で $J_{12} = J$ 、確率 $1-p$ で $J_{12} = 0$ という値をとるという事を用いて、T-matrix の disorder average $\langle T \rangle = 0$ 、すなわち、

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= p [V(1 - G^R V)^{-1}]_{J_{12}=J} + (1-p) [V(1 - G^R V)^{-1}]_{J_{12}=0} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.13)$$

を計算すればよい。反強磁性スピン波の問題に関して、具体的に (4.13) 式を評価すると、

$$pJ - W(\omega) + 2W(\omega) \{J - W(\omega)\} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{zW(\omega)(1 - f_{\mathbf{q}}^2)}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{q})} = 0 \quad (4.14)$$

となる。但し、 $\omega_0^2(\mathbf{q}) = \{zW(\omega)\}^2(1-f_q^2)$, $f_q \equiv (1/z)\sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}}$ (\mathbf{a} は最近接格子点の位置ベクトル), N は系のサイト数、また z は系の配位数 (彼らの論文 [23] では単純立方格子を考えているので、 $z = 2d = 6$) である。この (4.14) 式の self-consistent 方程式を解いて得られる $W(\omega)$ を用いて、有効媒質グリーン関数は、

$$G_{\mathbf{nn}'}^R(\omega) = \frac{1}{2SN} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{q})} \begin{pmatrix} \omega + zW(\omega) & -zW(\omega)f_q \\ zW(\omega)f_q & \omega - zW(\omega) \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

と表す事ができる。その結果得られる有効媒質グリーン関数を用いて、動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ は

$$S(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{nn}'} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} \left[(1 + \sigma_{\mathbf{n}}\sigma_{\mathbf{n}'}) \left\{ (G_{\mathbf{nn}'}^R)_{11} - (G_{\mathbf{nn}'}^R)_{22} \right\} + (1 - \sigma_{\mathbf{n}}\sigma_{\mathbf{n}'}) \left\{ (G_{\mathbf{nn}'}^R)_{12} - (G_{\mathbf{nn}'}^R)_{21} \right\} \right] \quad (4.16)$$

として与えられる。ここで $\sigma_{\mathbf{n}}$ は、 \mathbf{n} サイトが up-spin サイトに属するときは +1、down-spin サイトに属するときは -1 をそれぞれ表している。(4.16) 式に (4.15) 式を代入する事により、

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto -\text{Im} \frac{zW(\omega)(1-f_q^2)}{\omega^2 - \{zW(\omega)\}^2(1-f_q^2)} \quad (4.17)$$

という表式が得られる。

上記の方法を用いて、Polatsek ら [23] は等方的なパーコレーション反強磁性体の動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ を求めた。波数 q が小さい ($1 - f_q^2 \sim 2q^2/z$) という極限において (4.17) は

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{c(\omega)q^2}{\omega} \left[\frac{\tau^{-1}(\omega)}{\{\omega - c(\omega)q\}^2 + \tau^{-2}(\omega)} + \frac{\tau^{-1}(\omega)}{\{\omega + c(\omega)q\}^2 + \tau^{-2}(\omega)} \right] \quad (4.18)$$

但し、stiffness constant $c(\omega)$ とピーク幅 $\tau^{-1}(\omega)$ は各々

$$c(\omega) = \sqrt{2z} \frac{|W|^2}{\text{Re } W} \quad (4.19)$$

$$\tau^{-1}(\omega) = \omega \frac{\text{Im } W}{\text{Re } W} \quad (4.20)$$

と整理できる。彼らは (4.14) 式の self-consistent 方程式を解くことにより、 d 次元系 ($2 < d < 4$) において有効媒質 $W(\omega)$ の ω 依存性は ω の小さな極限で

$$\text{Re } W(\omega) \propto \begin{cases} J(p - p_c) & \text{for } \omega \ll \omega_c \\ \omega^{2/3} & \text{for } \omega \gg \omega_c \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\text{Im } W(\omega) \propto \begin{cases} J(p - p_c)^d & \text{for } \omega \ll \omega_c \\ \omega^{2/3} & \text{for } \omega \gg \omega_c \end{cases} \quad (4.22)$$

となるという表式を得た。

上記の結果から、 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の漸近的な ω 依存性は、 q を一定としたとき

(i) $\omega \rightarrow 0$

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{1}{c\omega\tau} \frac{\omega^d}{(p - p_c)^{d+2}} \quad (4.23)$$

(ii) $\omega \gg \omega_c$, $(\omega/\omega_c) > (q/q_c)^3$

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{c\tau}{\omega} q^2 \omega^{-4/3} \quad (4.24)$$

(iii) $\omega \gg \omega_c$, $(\omega/\omega_c) < (q/q_c)^3$

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{1}{c\omega\tau} \omega^{-2/3} \quad (4.25)$$

となる。また、 ω を一定としたときの漸近的な q 依存性は、

(i) $q \rightarrow 0$

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{c\tau}{\omega} q^2 \quad (4.26)$$

(ii) $q^2 > q_{\max}^2 \equiv \frac{\omega^2}{|W(\omega)|^2}$

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{1}{c\omega\tau} q^{-2} \quad (4.27)$$

となる。また、ピーク幅 ($\approx \tau^{-1}(\omega)$) は、

$$\tau^{-1}(\omega) \propto \begin{cases} \omega^{d+1}/(p-p_c)^{d+1} & \omega \ll \omega_c \\ \omega & \omega \gg \omega_c \end{cases} \quad (4.28)$$

に従う。ここで、マグノン領域 ($\omega \ll \omega_c$) では $\tau^{-1}(\omega) \propto \omega^{d+1}$ という Rayleigh law に従うことが分かる。また、 $\omega \gg \omega_c$ では $\omega\tau(\omega) \sim 1$ という Ioffe-Regel condition を満たしていることも分かる。EMA によって求められた $S(\mathbf{q}, \omega)$ の結果を図 4.3(a-c) に示す。それによると $q\xi \ll 1$ においては、 $S(\mathbf{q}, \omega)$ は通常のマグノンの分散関係、すなわち linear dispersion

$$\omega = c(p)q \quad (4.29)$$

に従った鋭いピークを持つ。但し、 $c(p)$ は系の濃度 p に依存する定数である。それに加えて、クロスオーバー・エネルギー $\omega = \omega_c$ 近傍に、高エネルギー側に tail をもつブロードな構造が存在する。彼らはこれを、フラクトンの存在を反映したものであると解釈した。 $q\xi \gg 1$ においては、スピン波励起の波長よりも系の相関長のほうが大きいため、系は自己相似的である。よって通常のマグノンは存在せず、ブロードなフラクトンからの寄与のみが存在する。フラクトンからのピークがブロードであるのは、フラクトンが Ioffe-Regel 的に局在 ($1/\tau \sim \omega$) している事の結果である。このように、波数 q の小さな領域で、 $S(\mathbf{q}, \omega)$ はダブルピーク構造を持つと予想されていた。

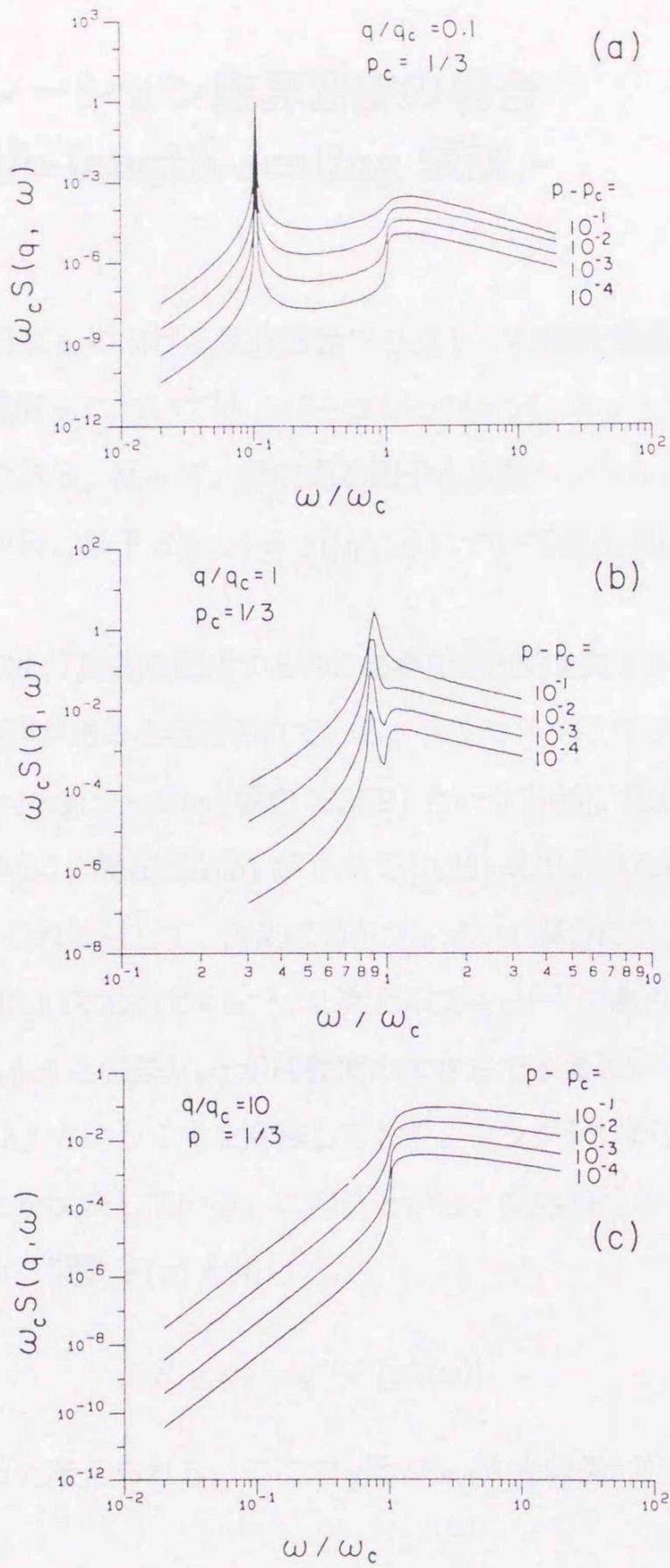


図 4. 3(a-c) 有効媒質近似による、パーコレーション反強磁性体の動的構造因子 [23]

4. 2 パーコレーション臨界濃度の場合 - single-length-scaling 仮説 -

本節では、臨界濃度 p_c における反強磁性フラクトンの動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ に関して述べる。臨界濃度 p_c においては、パーコレーションネットワーク上の磁性原子の配置は等方的である。従って、動的構造因子も波数ベクトル \mathbf{q} に関して等方的である。このことから、以下 $S(q, \omega) = S(|\mathbf{q}|, \omega)$ について考えればよい。

フラクトン励起には、「励起を記述するのに必要な特徴的な長さが1つしか存在しない」という重要な性質があると考えられている。フラクトンにこのような性質があるとする仮定を single-length-scaling 仮説 (SLSP) という [108]。SLSP が成立すると、散乱長 $l_s(\omega)$ 、波長 $\lambda(\omega)$ 、局在長 $\Lambda(\omega)$ がすべて (2.24) 式のような同じ振動数依存性をもつことになる。これに対して、例えば局在フォノンの場合には、 $l_s(\omega) \sim \omega^{-(d+1)}$ 、 $\lambda(\omega) \sim \omega^{-1}$ 、 $\Lambda(\omega)$ は1次元系で $\sim \omega^{-2}$ 、2次元系で $\sim e^{1/\omega^2}$ であり、SLSP は成立していない。散乱長 $l_s(\omega)$ と波長 $\lambda(\omega)$ が同程度の大きさであるということは、 $kl_s \sim 1$ (k は波数、 $k = 2\pi/\lambda$) ということを意味しており、フラクトンが Ioffe-Regel 的に強く局在していることを反映している。このことから、反強磁性フラクトンの動的構造因子はスケーリング関数 $F(x)$ を用いて、

$$S(q, \omega) = q^{-y} F[q\Lambda(\omega)] \quad (4.30)$$

という関数形に従うと考えられる。ここで y は $S(q, \omega)$ を特徴づける指数である。

前節に述べたように Christou と Stinchcombe [65] は、Green's function method を用いて、長波長極限 $q\xi \ll 1$ における $S(q, \omega)$ の振る舞いを解析的に導いた ((4.10) 式)。その結論によると、動的構造因子は ω 依存性に関して Lorentzian になっている

事が分かる。彼らは $q \rightarrow 0$ 、 $\xi \rightarrow \infty$ 、 $q\xi \ll 1$ という条件下 (hydrodynamic limit) で、上記の表式を導いた。この式はフラクトン領域 ($q\xi \gg 1$) については何も言及していないが、マグノン ($q\xi \ll 1$) とフラクトン ($q\xi \gg 1$) の matching condition ($q\xi \approx 1$) を考え、(4.10) 式で $q\xi \rightarrow const.$ とおくと、フラクトン領域 ($q\xi \gg 1$) においても $S(q, \omega)$ の ω 依存性は Lorentzian に従うのではないかと予想される [97]。ちなみにこのとき (4.10) 式において、 ω 依存性のピーク位置は $\omega \sim q^z$ というフラクトンの分散関係と一致することがわかる。 $S(q, \omega)$ はそのピーク位置 $\omega_c(q)$ の q 依存性がスピン波励起の分散関係を与え、 ω 依存性のピーク幅 $\Gamma(q)$ は散乱時間の逆数 $\sim 1/\tau$ に対応する。すなわち具体的に $S(q, \omega)$ は、

$$S(q, \omega) = G(q) \frac{\Gamma(q)}{\{\omega - \omega_c(q)\}^2 + \Gamma^2(q)} \quad (4.31)$$

と書けるであろう。ここで $\omega_c(q)$ はピーク位置、 $\Gamma(q)$ はピーク幅であり、 $G(q)$ は q に依存する関数である。ここで single-length-scaling 仮説より、ピーク位置 $\omega_c(q)$ もピーク幅 $\Gamma(q)$ も同じ q 依存性 $\sim q^{z_{AF}}$ に従うはずである。このことは (4.3)、(4.4) 式より明らかである [64, 65]。以下では $\omega_c(q) = \omega_0 q^{z_{AF}}$ (分散関係)、 $\Gamma(q) = \Gamma_0 q^{z_{AF}}$ と書く。このことと (4.30) 式を比較する事により、 $S(q, \omega)$ は

$$S(q, \omega) = G_0 \frac{\Gamma_0 q^{2z_{AF}-y}}{(\omega - \omega_0 q^{z_{AF}})^2 + \Gamma_0^2 q^{2z_{AF}}} \quad (4.32)$$

となると考えられる。このことから、 $S(q, \omega)$ の漸近的振る舞いは、 $q\Lambda(\omega) \ll 1$ で $S(q, \omega) \sim \omega^{-2} q^{-y+2z_{AF}}$ 、 $q\Lambda(\omega) \gg 1$ で $S(q, \omega) \sim q^{-y}$ となるであろうと予想される [97]。

実際に臨界濃度 p_c における動的構造因子の振る舞いを明らかにするため、行列対角化の方法を用いて動的構造因子の数値計算を行った。本論文では、線形スピン波近似の下で古典ハイゼンベルグ反強磁性体の動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ を、ダイナミカル・マトリックス D_{mn} の左右固有ベクトルを用いて表す事ができた。以下では、そ

の表式を導出する。外部磁場中の反強磁性スピン波の運動方程式は、

$$i\frac{\partial}{\partial t}S_m^+(t) = \sum_n D_{mn}S_n^+(t) - \sigma_m h_m^+(t) \quad (4.33)$$

とかける。但し、 D_{mn} は $m \neq n$ のとき $D_{mn} = \sigma_m J_{mn}$ 、 $m = n$ のとき $D_{mm} = \sigma_m \sum_n J_{mn}$ と定義される。また $h_m^+(t) \equiv h_m^x(t) + ih_m^y(t)$ は m サイトにかかっている横磁場の大きさである。ここで、 $S_m^+(\omega)$ 、 $h_m^+(\omega)$ を各々スピン変位 $S_m^+(t)$ と横磁場 $h_m^+(t)$ の時間フーリエ変換であるとする、(4.33) 式は、

$$\sum_n G_{mn}(\omega)S_n^+(\omega) = -h_m^+(\omega) \quad (4.34)$$

と書き直す事ができる。ここで、 $G_{mn}(\omega) \equiv \sigma_m(\delta_{m,n}\omega - D_{mn})$ と定義した。ここで 2 点相関関数 $\chi_{mn}(\omega) \equiv S_m^+(\omega)/h_n^+(\omega)$ とその空間フーリエ変換 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を導入すると [109]、 $\chi_{mn}(\omega)$ は $\chi_{mn}(\omega) = -\{\mathbf{G}(\omega)^{-1}\}_{mn}$ と表す事ができ、その結果 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ は

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{q}, \omega) &\equiv \frac{1}{V} \sum_m \sum_n e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \chi_{mn}(\omega) \\ &= -\frac{1}{V} \sum_m \sum_n e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \{\mathbf{G}(\omega)^{-1}\}_{mn} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} \end{aligned} \quad (4.35)$$

と表す事ができる。ここで表記の都合上、

$$e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} = \sum_\lambda C_\lambda u'_m(\lambda) \quad (4.36)$$

($u'_m(\lambda) \equiv \sigma_m u_m(\lambda)$) として記号 C_λ を導入する。ここで C_λ は

$$C_\lambda = \sum_m v'_m(\lambda) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \quad (4.37)$$

($v'_m(\lambda) \equiv \sigma_m v_m(\lambda)$) として表される事が (4.36) 式から分かる。これらの関係式を用いて、(4.35) 式は、

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{V} \sum_m \sum_n e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \{\mathbf{G}(\omega)^{-1}\}_{mn} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{V} \sum_{\lambda} C_{\lambda} \sum_m e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \sum_n \left\{ \mathbf{G}(\omega)^{-1} \right\}_{mn} u'_n(\lambda) \\
&= -\frac{1}{V} \sum_{\lambda} \frac{C_{\lambda}}{\omega - \omega_{\lambda}} \left\{ \sum_m e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} u_m(\lambda) \right\} \\
&= -\frac{1}{V} \sum_{\lambda} \frac{1}{\omega - \omega_{\lambda}} \left\{ \sum_m e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} v'_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} u_n(\lambda) \right\} \quad (4.38)
\end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{G}(\omega)|u(\lambda)\rangle = (\omega - \omega_{\lambda})|u'(\lambda)\rangle$ ($|u(\lambda)\rangle \equiv (u_1(\lambda), u_2(\lambda), \dots)^T$) という関係式を用いた。上記の事実より、動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega) = \langle n+1 | \chi''(\mathbf{q}, \omega)$ は

$$\begin{aligned}
\chi''(\mathbf{q}, \omega) &= \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Im} [\chi(\mathbf{q}, \omega + i\delta)] \\
&= \frac{\pi}{V} \sum_{\lambda} \delta(\omega - \omega_{\lambda}) \left\{ \sum_m e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} v'_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} u_n(\lambda) \right\} \quad (4.39)
\end{aligned}$$

を用いて表される事が分かった [90, 97]。

2次元正方格子に構成されたボンド・パーコレーション ($p_c = 0.50$) において、システムサイズ 62×62 の系で行列対角化の方法により数値計算を行った。系の境界条件は周期境界として、54 サンプルに関してアンサンブル平均をとった。図 3.4 から分かるように、今回計算した ω 領域での局在長は $6 < \Lambda(\omega) < 30$ 程度であり、システムサイズは $L = 62$ であるので、有限サイズ効果は (ω の大きな領域では) それほど問題にならないと考えられる。 $S(q, \omega)$ の ω, q 依存性に関する計算結果を、図 4.4 に示す。波数ベクトル \mathbf{q} は、磁気的ブリルアンゾーン全領域にわたって計算を行い、方向平均をとった ($q = |\mathbf{q}|$)。次に、臨界濃度 p_c における反強磁性フラクトンに関して、SLSP が成立しているか否かを検証した。(4.30) 式より、 $q\Lambda(\omega)$ が一定の値をとるような ω と q の組み合わせに対して、 $S(q, \omega)$ は q^{-y} に比例すると予想される。従って、計算された $S(q, \omega)$ に対してこのようなプロットを行い、 q 依存性を最小二乗法でフィッティングする事により、指数 y を求める事ができる。実際の数値計算では、異なる $\omega/\omega_c(q)$ および $q/q_c(\omega)$ (ただし $q_c(\omega) \sim \omega^{1/z_{AF}}$) に対して指数 y および y/z_{AF} を各々求め、これらの平均をとることによって y および y/z_{AF} の値を決定

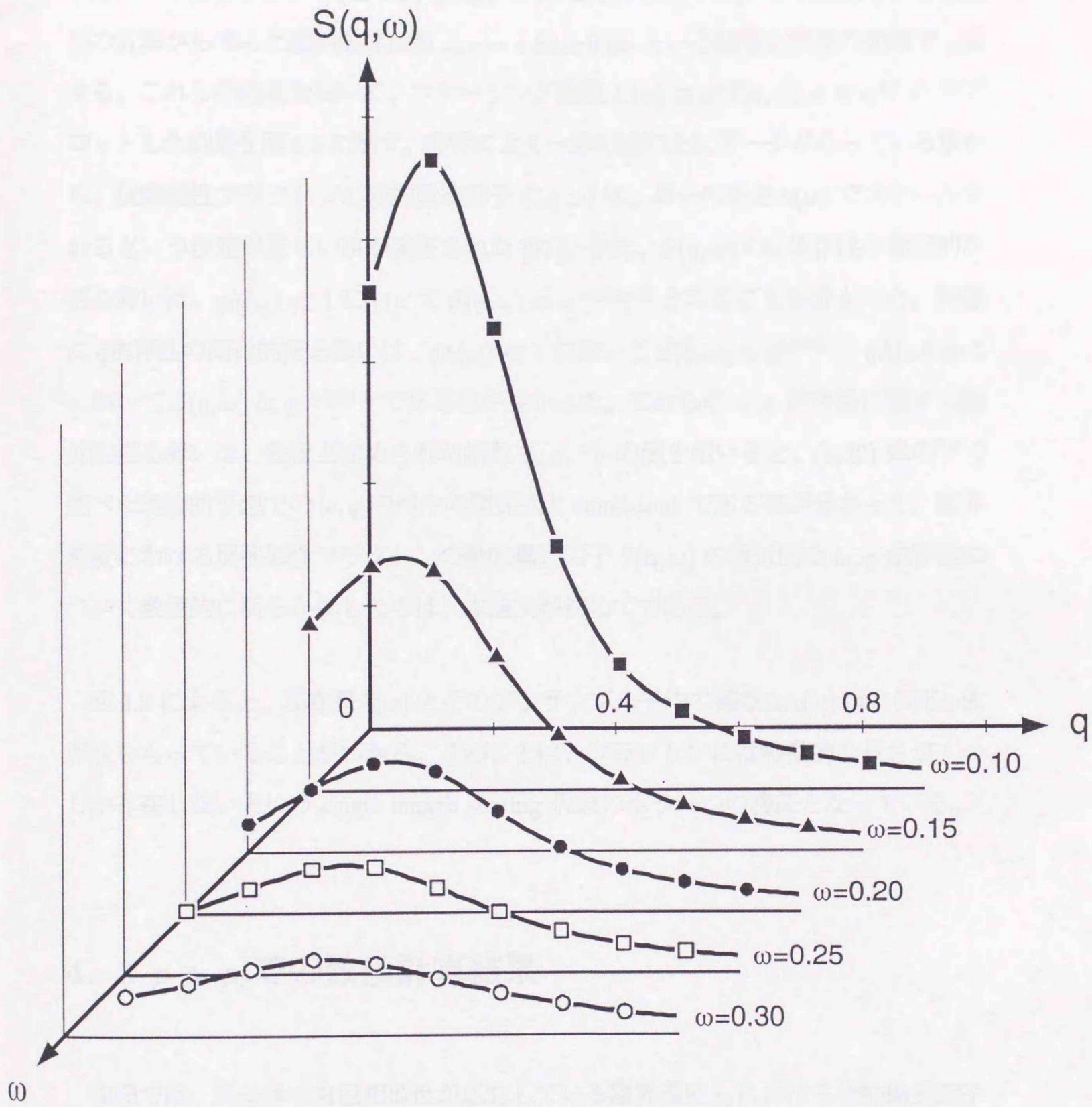


図 4. 4 $d=2$ 臨界濃度における反強磁性フラクトンの動的構造因子 [97]

した。その結果、 $y = 3.0 \pm 0.3$ 、 $y/z_{AF} = 1.7 \pm 0.3$ となった。この結果は、分散関係の計算から求めた動的臨界指数 $z_{AF} = 1.83 \pm 0.08$ という結果と誤差の範囲で一致する。これらの結果を用いて、スケーリング関数 $F(x) (\equiv q^y S(q, \omega), x \equiv q\Lambda(\omega))$ をプロットした結果を図 4.5 に示す。非常によく一本の線の上にデータがのっていることから、反強磁性フラクトンの動的構造因子 $S(q, \omega)$ は、単一の長さ $\Lambda(\omega)$ でスケールされるという仮定が正しい事が実証された [97]。また、 $S(q, \omega)$ の ω 依存性の漸近的な振る舞いは、 $q\Lambda(\omega) \ll 1$ において $S(q, \omega) \propto \omega^{-1.9 \pm 0.1}$ となることが分かった。同様に q 依存性の漸近的振る舞いは、 $q\Lambda(\omega) \ll 1$ において $S(q, \omega) \propto q^{0.5 \pm 0.1}$ 、 $q\Lambda(\omega) \gg 1$ において $S(q, \omega) \propto q^{-2.8 \pm 0.1}$ である事が分かった。これらの ω, q 依存性に関する漸近的振る舞いは、先ほど求められた指数 z_{AF} 、 y の値を用いると、(4.32) 式の下で述べた理論的予想での ω, q のべきの関係式と consistent である事が分かった。臨界濃度における反強磁性フラクトンの動的構造因子 $S(q, \omega)$ の漸近的な ω, q 依存性について数値的に明らかにしたのは、本論文が初めてである。

図 3.3 によると、局在長 $\Lambda(\omega)$ とそのアンサンブル平均の偏差 $\Delta\Lambda(\omega)$ は、同じ ω 依存性をもっていることがわかる。このことは、フラクトンには特徴的な長さが 1 つしか存在しないという single-length-scaling 仮説のもう一つの傍証となっている。

4. 3 $p > p_c$ での数値計算結果

前節では、系全体で自己相似性が成立している臨界濃度 p_c における動的構造因子について述べた。パーコレーション濃度 p が臨界濃度 p_c より高い濃度をもつ系における動的性質を調べる事も重要である。なぜならば従来の中性子非弾性散乱実験による研究の大部分は $p > p_c$ で行われているからである。

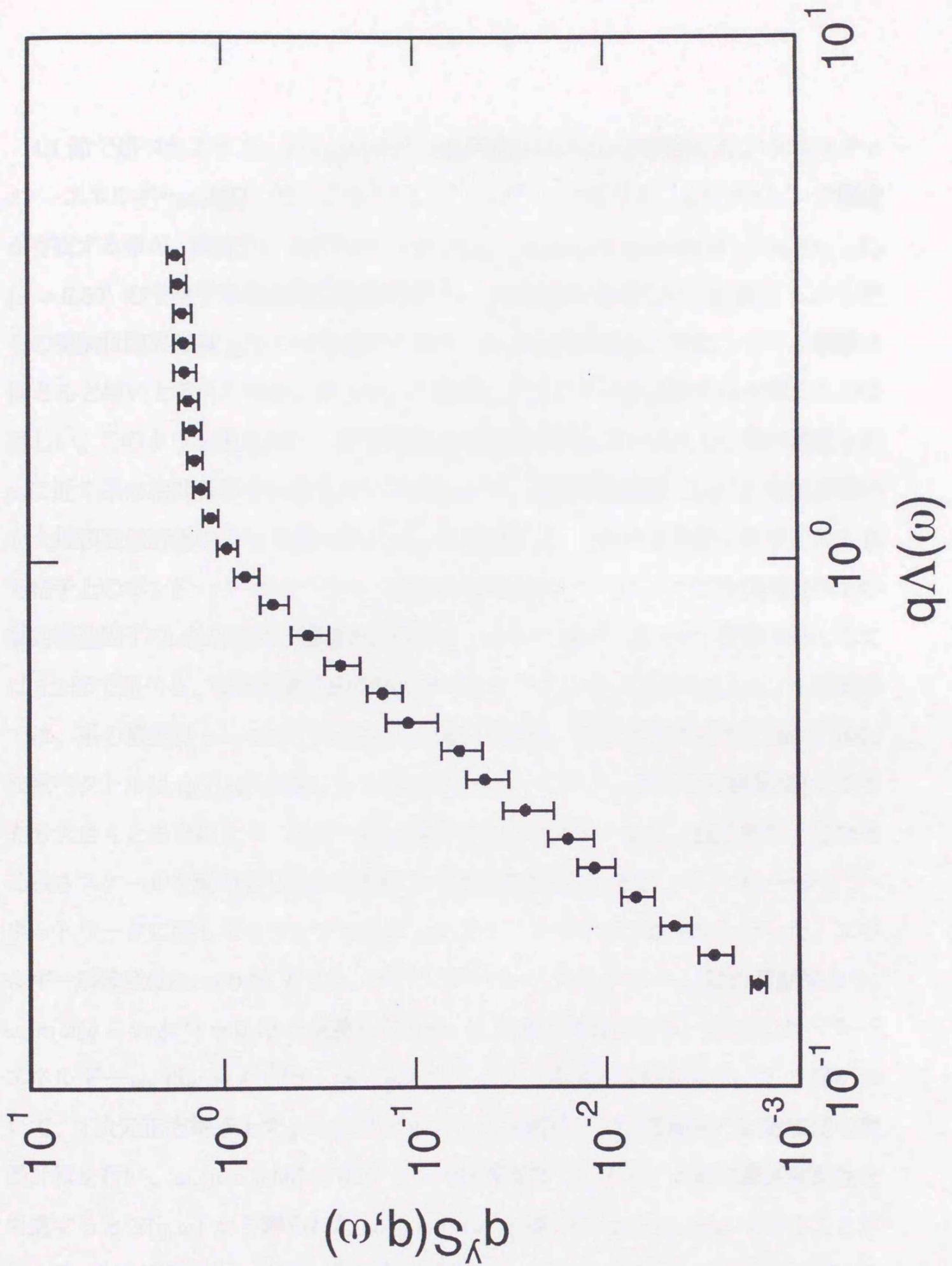


図4.5 反強磁性フラクトンの動的構造因子：スケーリング関数 $F(x)$ [97]

4.1 節で述べたように、 $p > p_c$ における動的構造因子の ω 依存性には、クロスオーバー・エネルギー ω_c 近傍においてマグノンとフラク톤の寄与によるダブルピーク構造が存在する事が、理論的に予想されていた [23]。Uemura-Birgeneau は、 $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ ($x = 0.50$) の中性子非弾性散乱実験を行い、この描像を支持した [33,34]。しかし彼らの実験は臨界濃度 p_c から十分離れており、系の自己相似性が成立している領域はほとんど無いと考えられる。従って、この系にフラク톤が存在すると考えるのは難しい。このような観点から、自己相似性の効果を明確に調べるため、系の濃度 p が p_c に近く系の相関長が十分に大きい系において、動的相関関数 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の振る舞いを大規模数値計算によって調べた [110]。具体的には、2次元正方格子及び3次元立方格子上のボンド・パーコレーションにおける等方的ハイゼンベルグ反強磁性体上の動的構造因子の ω 依存性を、複数の波数ベクトル \mathbf{q} に関して求めた。計算方法としては5.2節で述べる、強制振動子法を基にする新しいアルゴリズムによった。2次元系では、系の濃度は $p = 0.58$ ($\xi \approx 29a$, a は格子定数)、システムサイズは 200×200 、波数ベクトルは $\mathbf{q} // [10]$ 方向にとった。すなわち、システムサイズを相関長 ξ よりも充分大きくとる事により、系が一様と見なせる長さスケールと、自己相似と見なせる長さスケールを両方含むという条件下で計算を行った。また、パーコレーション・ネットワークに関して6サンプル計算した上で、アンサンブル平均を行った。エネルギー解像度は $\delta\omega \approx 0.02$ とした。クロスオーバー・エネルギー ω_c は計算結果より、 $\omega_c \approx \omega(q = 2\pi\xi^{-1}) \approx 0.12$ と見積もられる。2.2節の議論により、クロスオーバー・エネルギー ω_c は $\omega_c \sim \xi^{-d/D_f} \sim (p - p_c)^{\nu d/D_f}$ という濃度依存性をもつ。3.2節において、2次元正方格子上で $p = 0.56$ における反強磁性スピン波励起の状態密度の数値計算を行い、 $\omega_c(p = 0.56) \sim 0.07$ という結果を得ているが、上記の濃度依存性を考慮すると $S(\mathbf{q}, \omega)$ から得られた $\omega_c(p = 0.58)$ の値とほぼ consistent であることがわかる。3次元系においては、系のサイズは $86 \times 86 \times 86$ であり、2つのサンプルに関して平均をとった。磁性原子の占有サイト数は、最大で501,400個である。クロ

スオーバー・エネルギーは、 $\omega_c \approx 0.12$ と見積もられる。 ω の解像度は $\delta\omega \approx 0.02$ とした。2次元系、3次元系共に周期境界条件下で数値計算を行った。

2次元系に関する計算結果を図4.6に示す。波数の小さな領域では、高エネルギー側にtailをもつ非対称な鋭いピークがみられる。波数を大きくすると、ピーク位置は高エネルギー側に移動し、急激にブロードになる。 $\omega > \omega_c$ において、 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の \mathbf{q} 依存性がほとんど見られないのは、フラクトンが空間的に極めて強く局在している事を反映していると考えられる。3次元系に関する動的構造因子を図4.7に示す。3次元系と定性的に同様の結果が得られた。上記の結果から、従来の研究による予想とは異なり、マグノン-フラクトン・クロスオーバーにおいて $S(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性はただ一つのピークしか持たない事が明らかとなった[110]。この結論は2次元系・3次元系共、臨界濃度に近いある特定の濃度 $p(\geq p_c)$ において得られたものであるが、スケーリング理論の立場からは任意の濃度で、マグノン-フラクトン・クロスオーバー($q\xi \sim 1$)における $S(q, \omega)$ の ω 依存性には唯一つのピークしか存在しないと考えられる。何故ならば(4.2)式において $q\xi \sim 1$ とすると、右辺のスケーリング関数 $F[q\xi, \omega q^{-z}]$ は一変数関数となり、 $S(q, \omega; \xi)$ の ω 依存性のプロファイルは ξ の値に依存しないからである。

上記の結果から、マグノン-フラクトン・クロスオーバーにおいては、動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ にはダブルピークが存在しない事が明らかにされた。では、Uemura-Birgeneauが $\text{Mn}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{F}_2$ で観測したダブルピークは何を反映したものであるのかという事が問題となる。最近Takahashi-Ikeda[63]は、 $\text{RbMn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_3$ において中性子非弾性散乱実験を行った。この物質は異方性が極めて小さく、ハイゼンベルグ型のパーコレーション反強磁性体の実験には非常に適した系である。その結果彼らは、小さな $q = |\mathbf{q}|$ に関しては鋭いピーク、大きな q に関しては複数のピークを観測した。

$S(q, \omega)$ (arb. units)

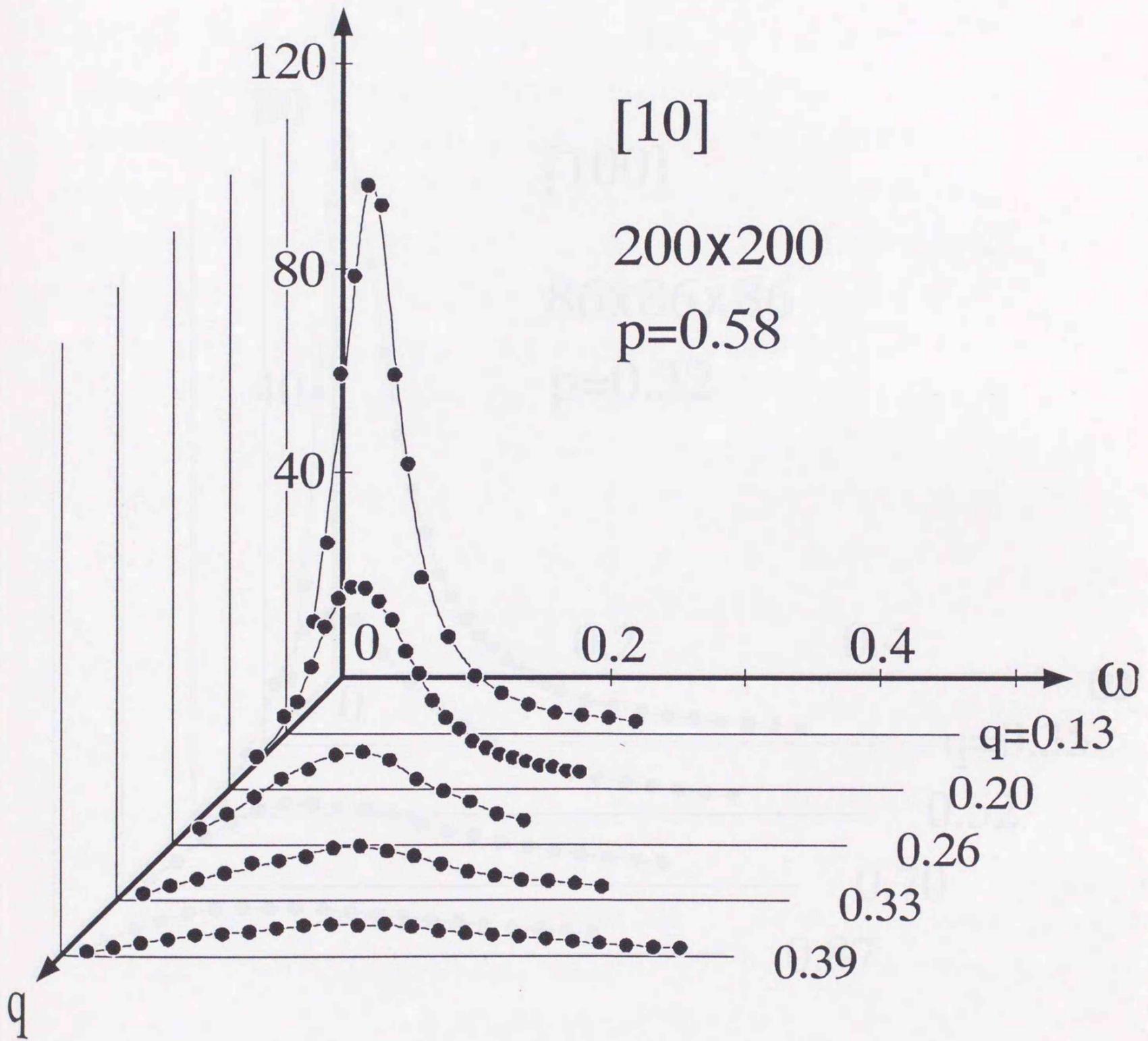


図4.6 d=2 マグノン-フラクトン・クロスオーバーにおける動的構造因子 [90, 110]

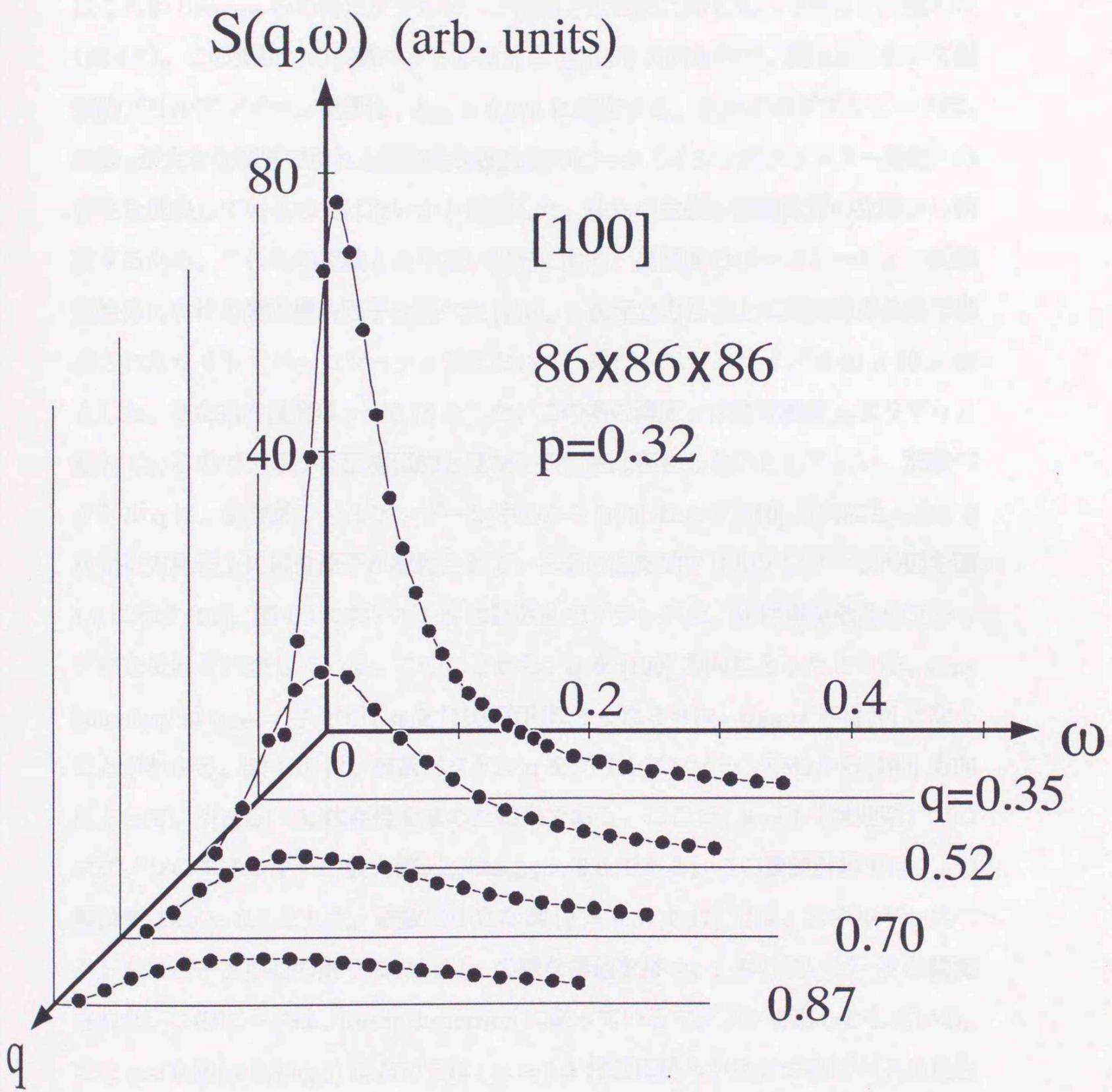


図4.7 d=3 マグノン-フラクトン・クロスオーバーにおける動的構造因子 [110]

また、その中間の波数 q において2つに割れたようなダブルピークを観測した。彼らはこれが Uemura らの得たダブルピーク構造と本質的に同じものであると主張した (図4.8)。この実験での波数ベクトルは $\mathbf{q} = \frac{2\pi}{a}[hh0]$ 方向なので、図4.8において磁気的ブリルアンゾーン境界は、 $h_{ZB} = 0.375$ に相当する。またこのダブルピークは、波数 q が大きな領域で現れる離散的な複数個のピーク (イジングクラスター励起) の存在を反映しているのではないかと指摘した。彼らの主張を数値計算の立場から検証するため、これらの実験とより近い状況にある、高濃度のパーコレーション反強磁性体における動的構造因子を調べた [110]。3次元立方格子上に周期境界条件で構成されたサイト・パーコレーションにおいて、系のシステムサイズは $40 \times 40 \times 40$ とした。また系の濃度は $p = 0.75$ とした。この系の濃度 p は臨界濃度 p_c よりずっと離れているので、系が自己相似的と見なせる領域は存在しないとしてよい。波数ベクトル \mathbf{q} は、磁気的ブリルアンゾーン中心から [100] および [110] 方向にとった。3次元正方格子上に磁性原子が配置されている系の磁気的ブリルアンゾーンの図を図4.9に示す [61]。図4.9において、Nは核散乱のブラッグ点、Mは磁気散乱のブラッグ点をそれぞれ表している。このことから、 \mathbf{q} を [100] 方向にとったときは、zone boundary は $\mathbf{q}_{ZB} = \frac{2\pi}{a}[\frac{1}{2}00]$ 、 \mathbf{q} を [110] 方向にとったときは、 $\mathbf{q}_{ZB} = \frac{2\pi}{a}[\frac{3}{8}\frac{3}{8}0]$ となることがわかる。図4.10は、波数ベクトル \mathbf{q} をブリルアンゾーン中心から [100] 方向にとって、 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性を求めた結果である。ここで、 $p = 1$ (規則系) でのマグノンのエネルギーの最大値 ω_{\max} は $\omega_{\max} = 6.0$ である。この数値計算では、 ω の解像度は $\delta\omega \approx 0.1$ とした。波数の小さな側 ($q = 0.31, 0.47$) では、エネルギースペクトルにピーク中心の周りに shoulder の様な構造を持つ、1本の鋭いピークが観測された。このピークは、linear dispersion に従っているマグノンをあらわしている。また $q \approx 0.79 (= 0.25q_{ZB})$ においては、 $\omega \approx 1.5$ 付近に明らかな2つのピークが見られる。この2つのピークのうち低エネルギー側は、ピーク的位置が波数 q を大きくするに従って linear dispersion で移動しているマグノン、高エネルギー側は、波数

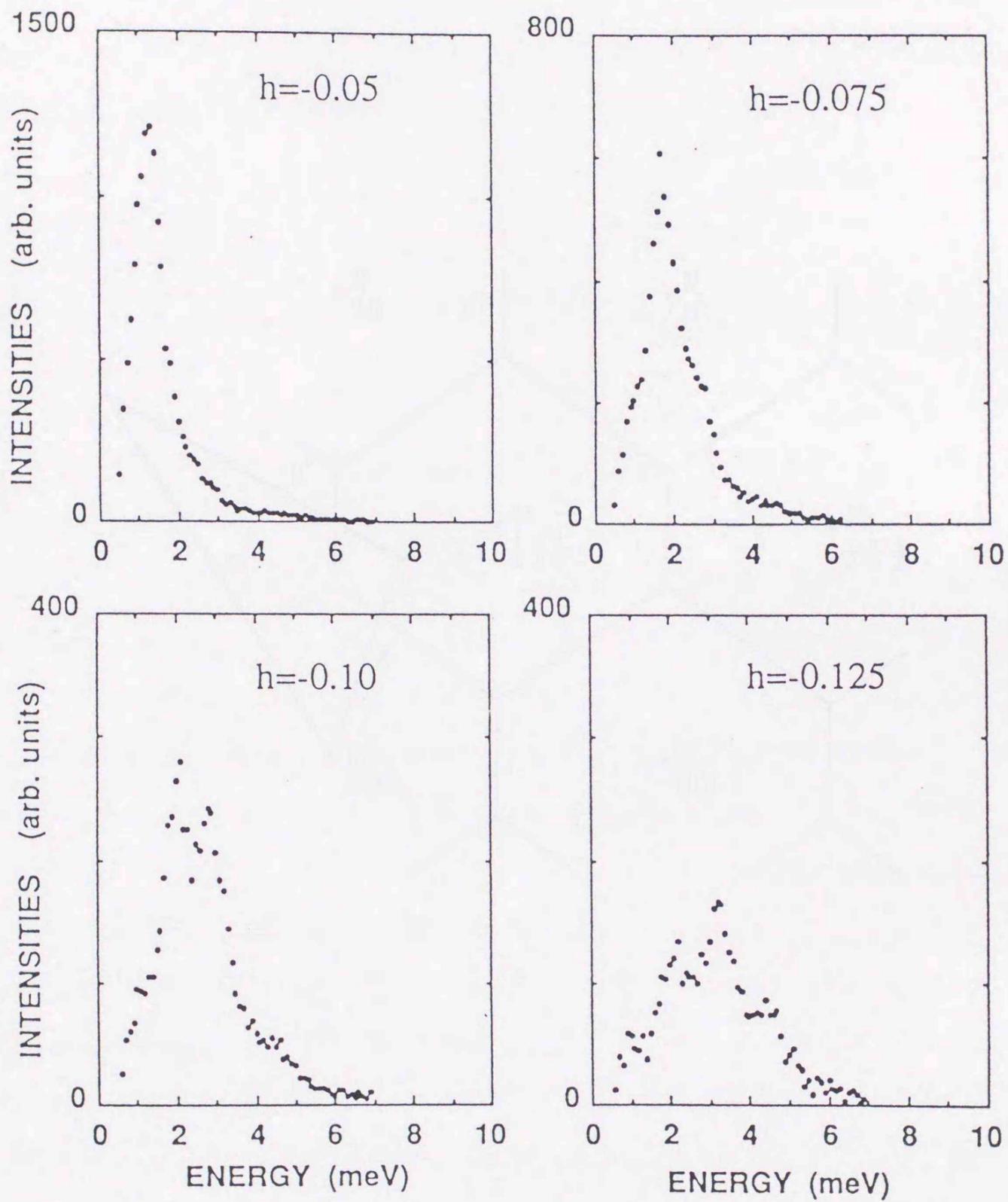


図 4. 8 Takahashi-Ikeda による、 $\text{RbMn}_{0.74}\text{Mg}_{0.26}\text{F}_3$ における中性子非弾性散乱実験 [63]

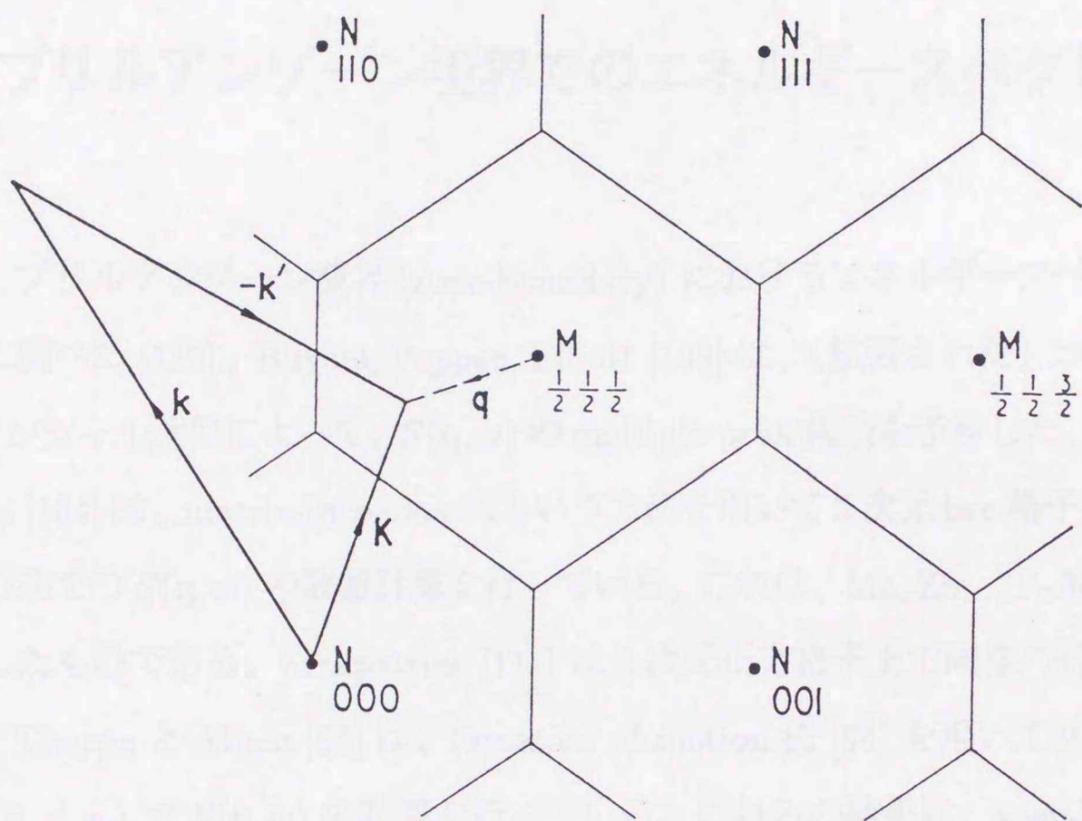


図 4. 9 $d=3$ 単純立方格子上的反強磁性体における逆格子空間 [61]

q が大きな領域で顕著に現れるイジングクラスター励起の寄与によるものであるとそれぞれ解釈できる。図4.11は、同様の系で波数ベクトル \mathbf{q} を[110]方向にとって解析した結果であり、定性的に図4.10と同様の結論が得られた。これらの結果は、Takahashi-Ikedaによる実験結果と非常によく一致している[110]。

4.4 ブリルアンゾーン境界でのエネルギースペクトル

次に、ブリルアンゾーン境界 (zone-boundary) におけるエネルギースペクトルを数値的に調べた[110]。Buyers, Pepper, Elliott [103]は、(拡張された) コヒーレント・ポテンシャル近似によって、 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の multiple-peak 構造を予言した。Holcomb と Harris [104]は、matrix-inversion 法という方法を用いて3次元bcc格子上の8192サイトの系での $S(\mathbf{q}, \omega)$ の数値計算を行っている。これは、 $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ 系での実験に対応したものである。Kirkpatrick [111]は2次元正方格子上で同様の計算を行っている。Thorpe と Alben [95]は、Equation of motion 法 [94]を用いて2次元正方格子上 ($p < p_c$) で $S(\mathbf{q}, \omega)$ の計算を行っている。これらの結果は、zone-boundary における複数ピーク構造を支持した。彼らはこのピークを、イジングクラスターモデルを用いて説明している。ここで、ハイゼンベルグ系の zone-boundary における振る舞いを理解するのに用いられてきた、イジングクラスターモデルについて述べる。ハイゼンベルグ磁性体のハミルトニアンは(2.28)式で表される。この系の励起状態を考える上で最も簡単な近似は、(2.28)式の右辺第2,3項を全く無視する事である[10]。すなわち、

$$\mathcal{H}' = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (4.40)$$

これは、イジング磁性体のハミルトニアンと全く同じものにほかならない。そこで、

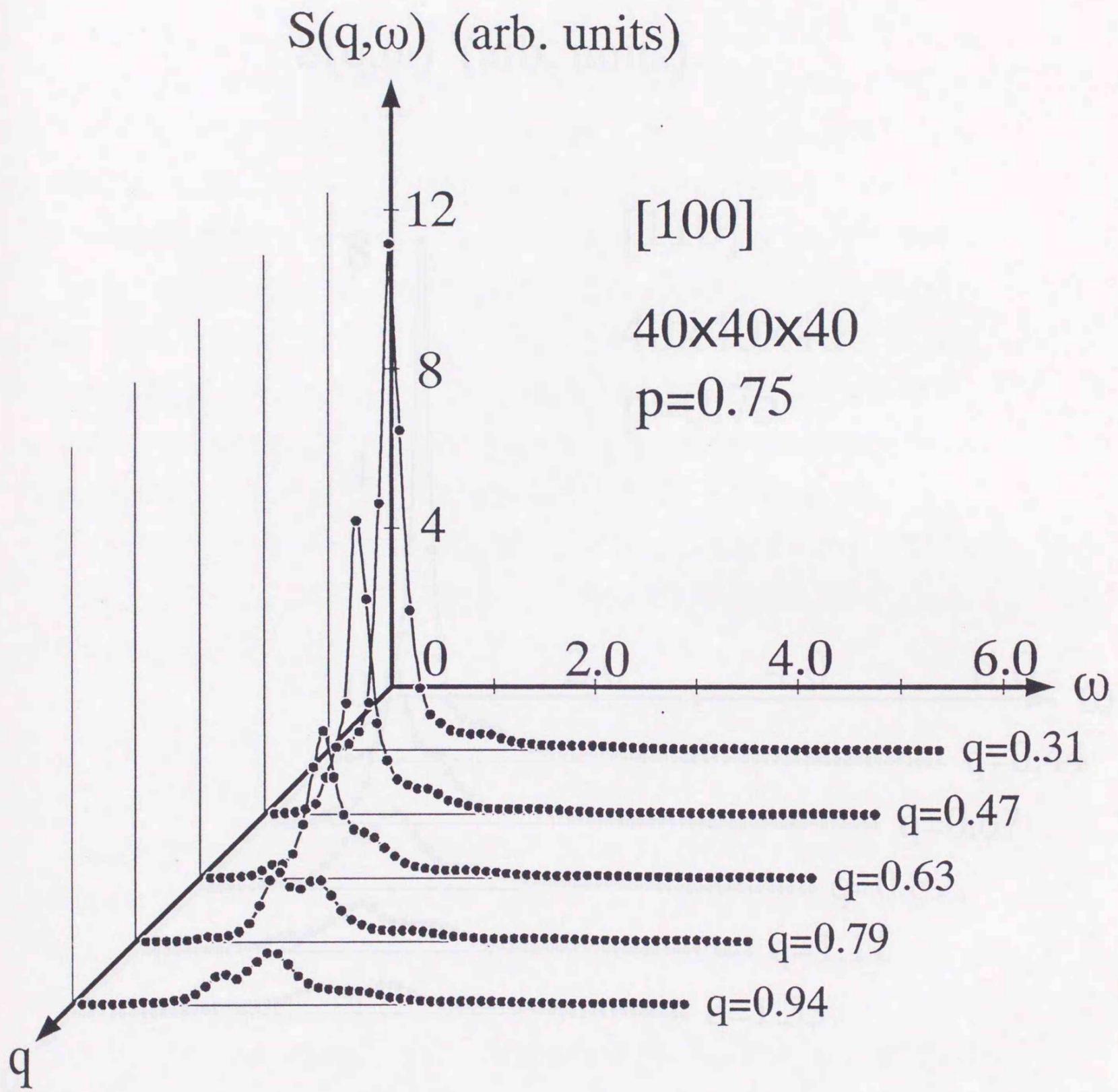


図 4. 10 $d=3, p=0.75, q//[100]$ における動的構造因子 [110]

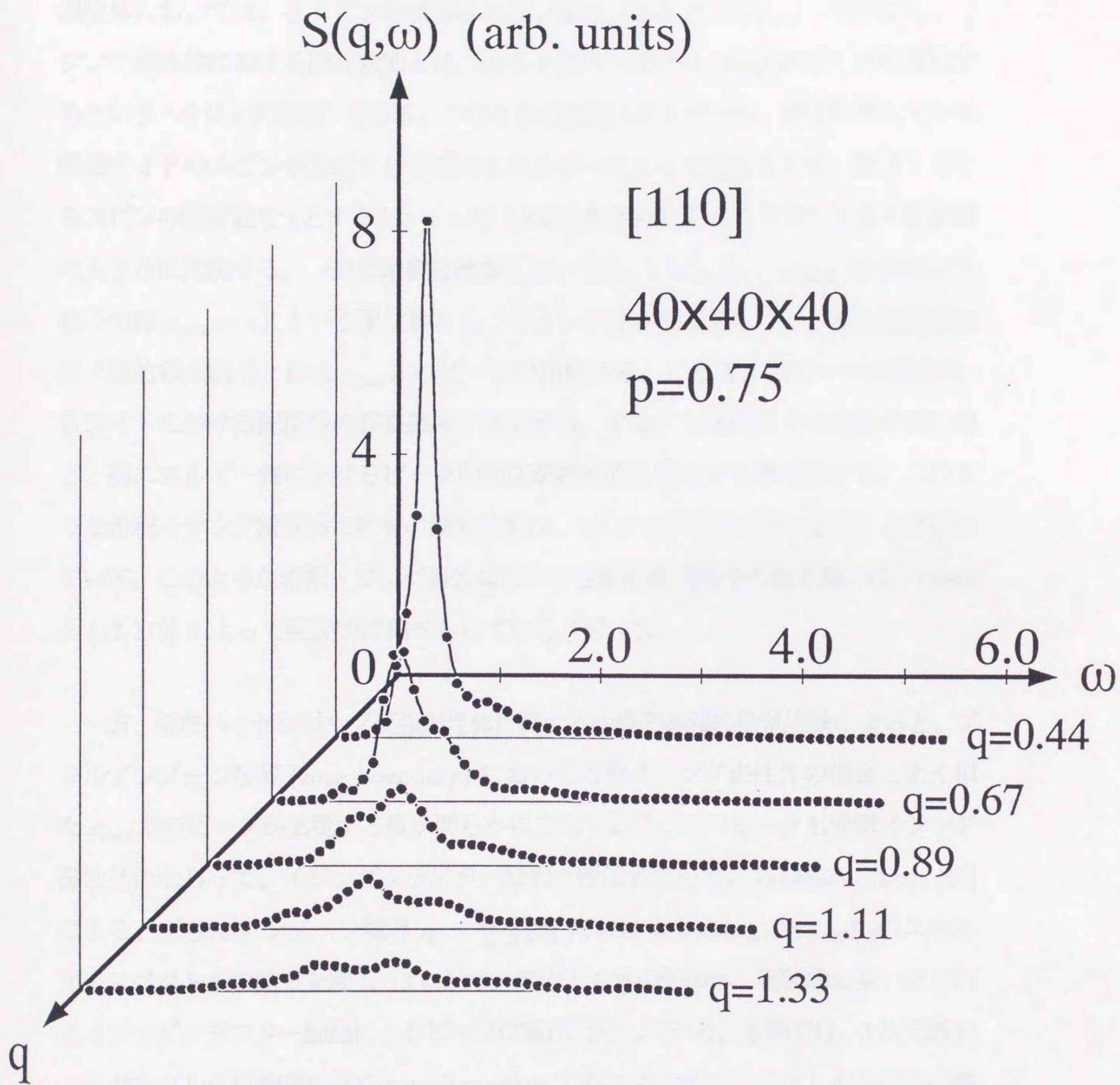


図 4. 11 $d=3, p=0.75, q//[110]$ における動的構造因子 $[110]$

まずイジング系での励起状態はどのようなものであるかについて述べる。イジング磁性体においては、各スピンの状態はスピン波の z 成分 S^z のみによって決まる。イジング磁性体における励起状態とは、ある1個のスピンの z 成分 S^z が1だけ変化するという“イジング励起”である。このときの励起エネルギーは、相互作用している隣接サイトのスピンの及ぼす分子場のエネルギーによって決まるので、注目しているスピンの配位数を z とすると $\omega = zJS$ (J は交換相互作用の大きさ) となり配位数の大きさに比例する。一般に希釈磁性体においては、 $z = 1, 2, \dots, z_{\max}$ (2次元正方格子では $z_{\max} = 4$) という配位数をもつサイトが各々存在するので、非弾性散乱強度 (動的構造因子) には z_{\max} 本のピークが出現する。この各々のピークの強度は、各サイトにおける配位数の存在確率に比例する。すなわち磁性原子の濃度が高いほど、高エネルギー側におけるピークの強度が相対的に増大する事が分かる。このような希釈イジング磁性体に特有の励起状態は、“イジングクラスター励起”と呼ばれている。このような希釈イジング磁性体における動的構造因子の振る舞いは、Ikedaら [17, 112] によって実験的に調べられている (図 4.12)。

一方、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体に関する中性子非弾性散乱実験によると、ブリルアンゾーン境界 (zone-boundary) において希釈イジング磁性体の場合とよく似た z_{\max} 本のピークが出現する事が明らかにされており、このピークも希釈イジング磁性体にならって、イジングクラスター励起と呼ばれている。Takahashi-Ikeda [63] による、ブリルアンゾーン境界 $\mathbf{q} = \frac{2\pi}{a} [\frac{3}{8} \frac{3}{8} 0]$ における $\text{RbMn}_{0.74}\text{Mg}_{0.26}\text{F}_3$ のエネルギースペクトルの結果を図 4.13 に示す。図中で6本の矢印が、実験的に見いだされたイジングクラスター励起によるピーク位置に対応している。本節では、3次元希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の zone-boundary でのエネルギースペクトル及びその濃度依存性を、5.2節で述べる方法を用いて数値的に調べた [110]。結果を図 4.14(a-c) に示す。系のシステムサイズは $60 \times 60 \times 60$ であり、従来行われた数値的研究に比べ

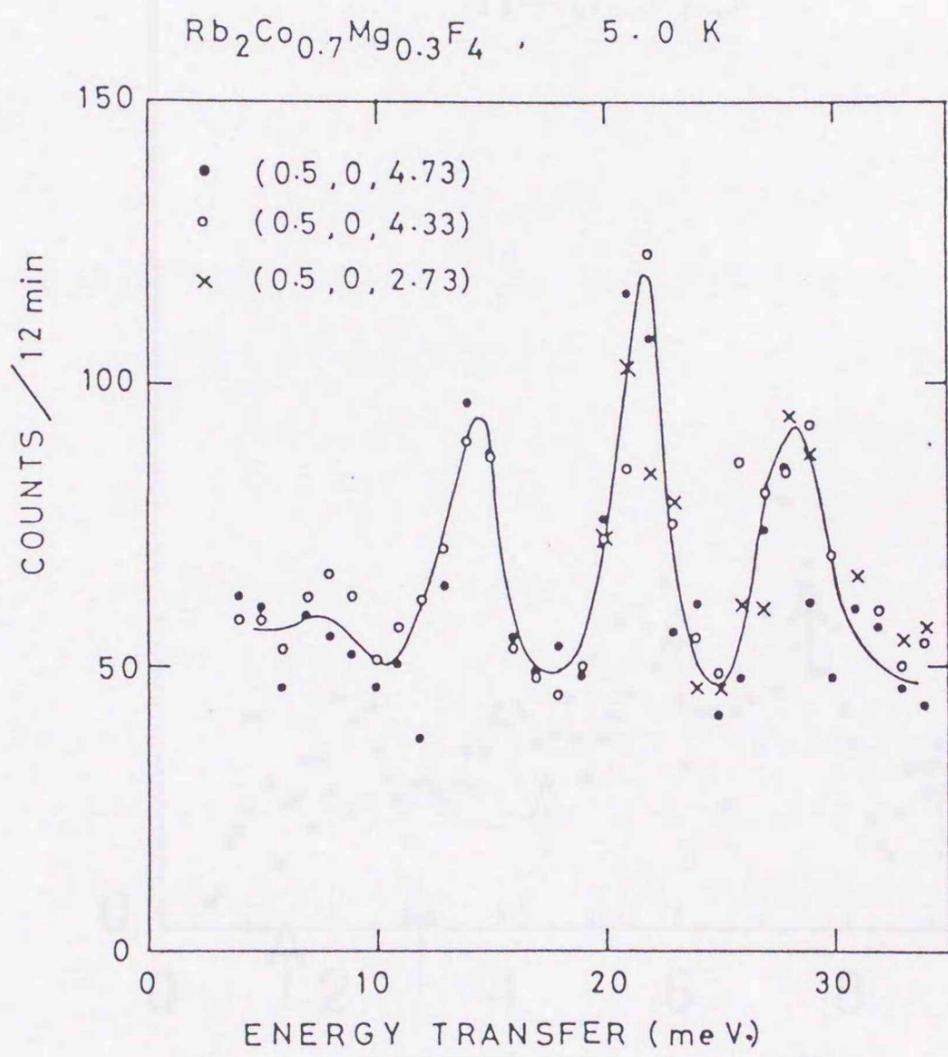


図 4. 12 希釈イジング磁性体 $\text{Rb}_2\text{Co}_{0.7}\text{Mg}_{0.3}\text{F}_4$ におけるエネルギースペクトル [112]

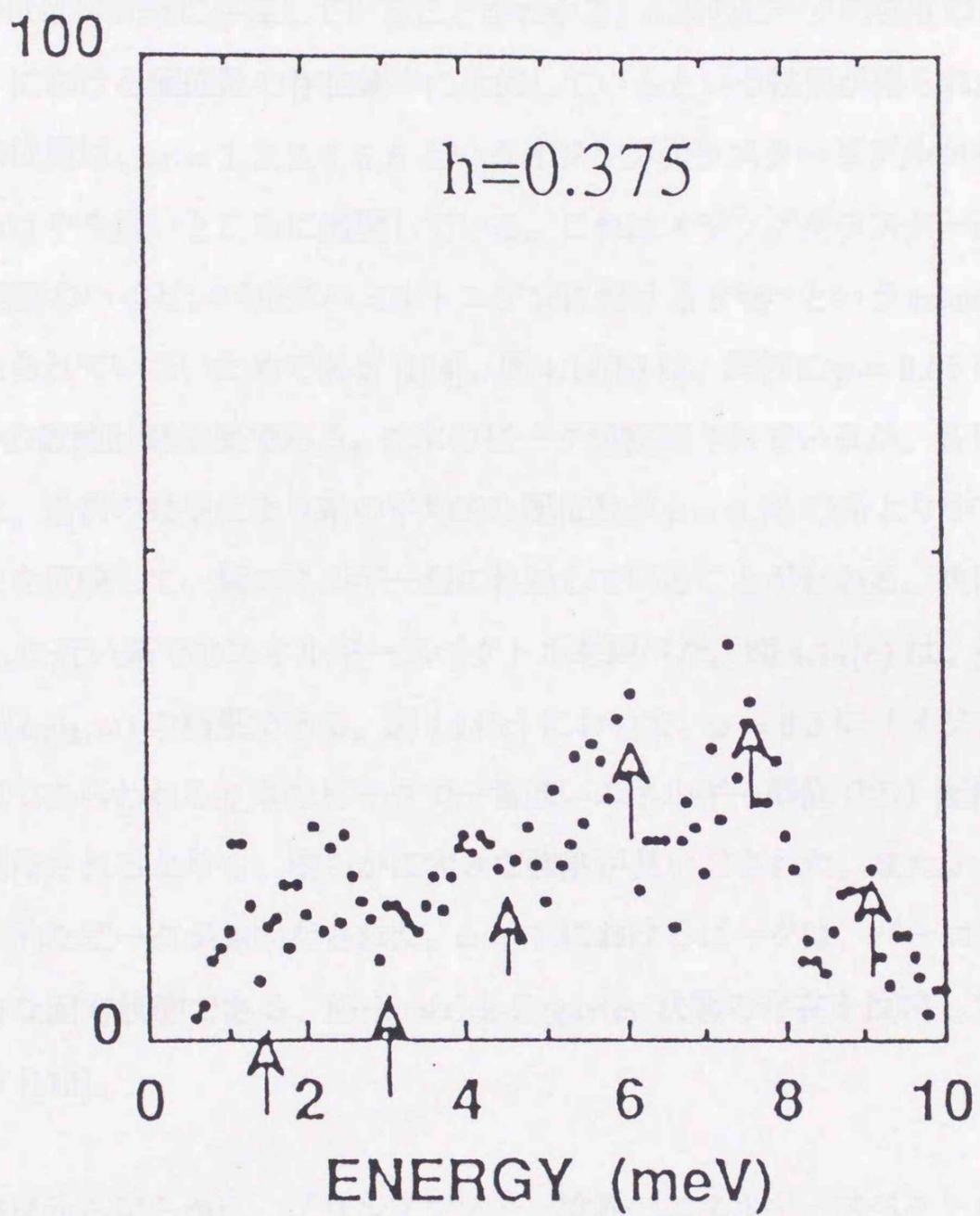


図4.13 ブリルアンゾーン境界における、 $\text{RbMn}_{0.74}\text{Mg}_{0.26}\text{F}_3$ のエネルギースペクトル [63]

てはるかに大きい。このことから、全エネルギー領域において、エネルギー解像度および精度の高い結果を得ることが容易となった。図4.14(a)は $p = 0.75$ における $S(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性の結果である。低エネルギー側ではあまり明瞭ではないが、6本のピークがほぼ等間隔に存在していることがわかる。6本のピークの強度の比は、ほぼ各サイトにおける配位数の存在確率に比例しているという結果が得られた。各々のピークの位置は、 $\omega = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ というイジングクラスターモデルから期待される値からはやや低いところに出現している。これはイジングクラスター近似においては、実際のハイゼンベルグハミルトニアンにおける S^+S^- という transverse 項が取り入れられていないためである [104]。図4.14(b)は、同様に $p = 0.65$ における $S(\mathbf{q}_{\text{ZB}}, \omega)$ の数値計算結果である。6本のピークが観測されているが、各ピークの強度分布は、希釈の効果により系の平均的な配位数が $p = 0.75$ の系より小さくなっていることを反映して、低エネルギー側に移動していることがわかる。次に、さらに濃度が p_c に近い系でのエネルギースペクトルを調べた。図4.14(c)は、 $p = 0.40$ における $S(\mathbf{q}_{\text{ZB}}, \omega)$ の結果である。図4.14(c)において、 $\omega \approx 0.3$ に（イジングクラスター近似であられる6本のピークで一番低いエネルギー準位での）配位数存在確率から期待されるよりも、明らかに大きな強度が見いだされた。また $\omega = 1$ のところに付加的なピークが見いだされた。 $\omega = 1$ におけるピークは、パーコレーション系に特有な固有状態である、Kirkpatrick-Eggarter 状態の存在を反映していると考えられる [113]。

上記の結果から明らかに、ブリルアンゾーン境界のエネルギースペクトルは、いずれの濃度においてもイジングクラスター励起による離散的なスペクトルに基づくピークが支配的である。ここで、希釈ハイゼンベルグ磁性体においてイジングクラスター励起と呼ばれているものがいかなる状態であるかを調べるため、2次元正方格子に構成されたサイト・パーコレーションにおけるハイゼンベルグ反強磁性体

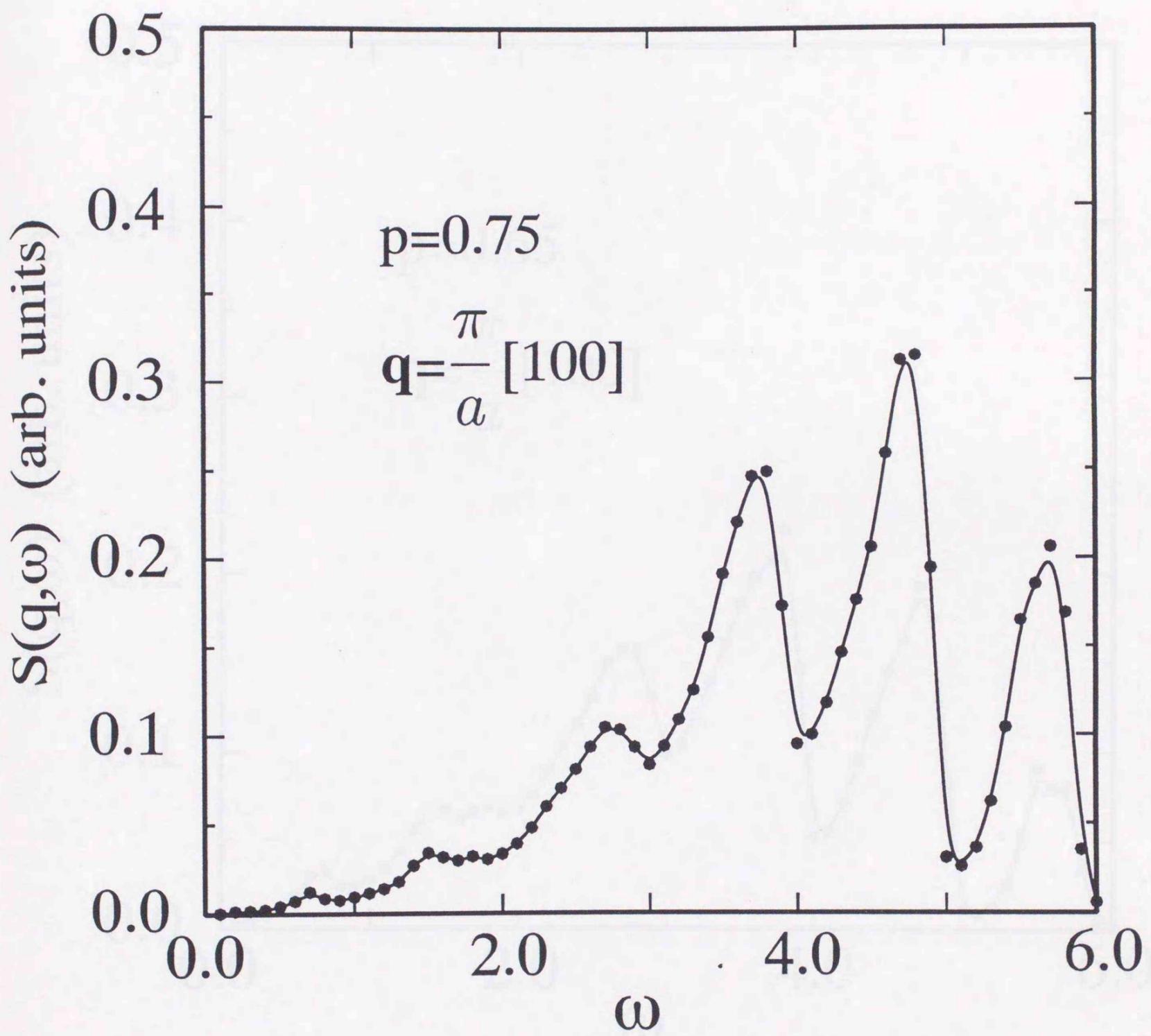


図 4. 14(a) $d=3, p=0.75$, magnetic zone-boundary における動的構造因子 [110]

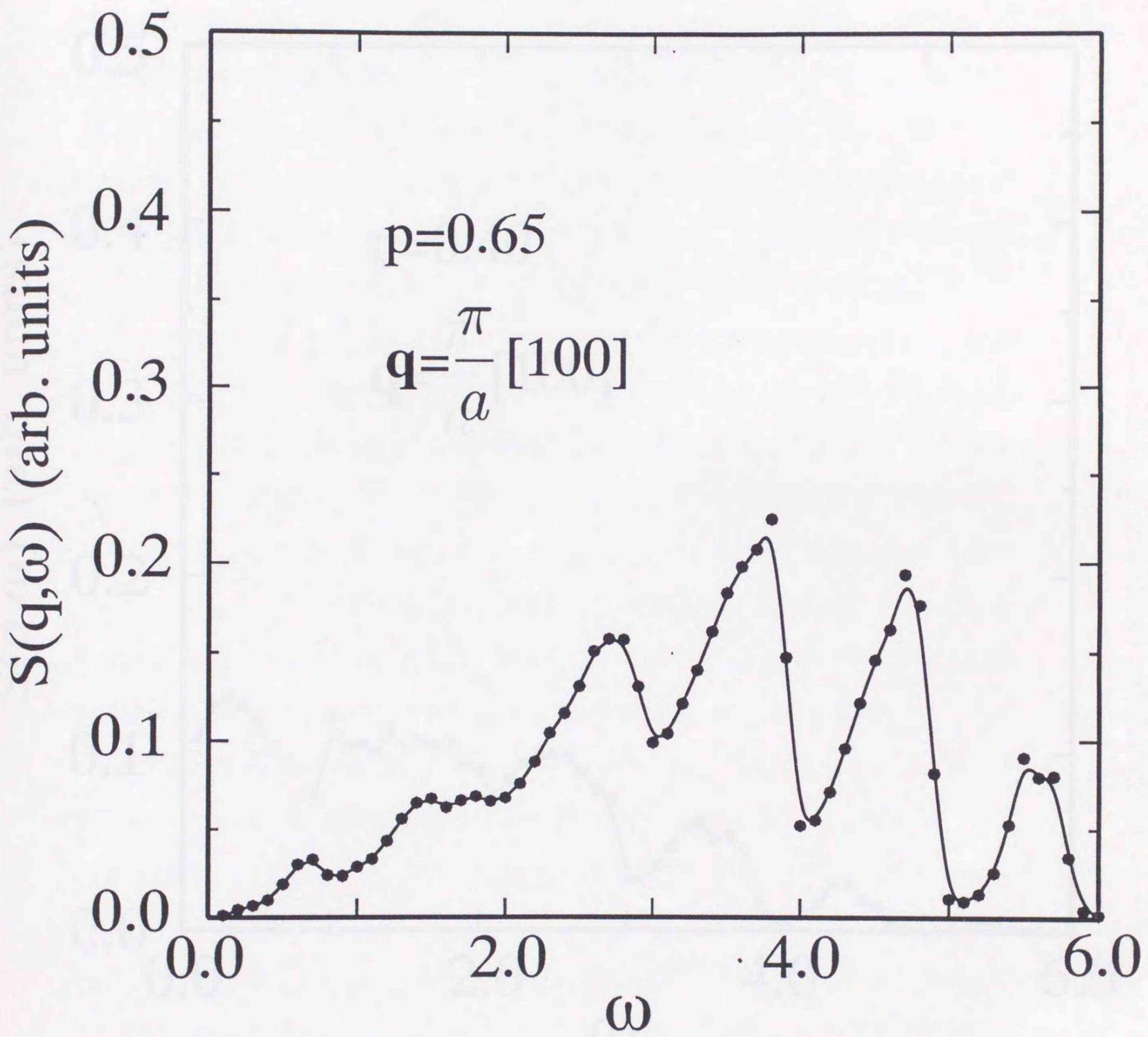


図 4. 14(b) $d=3, p=0.65$, magnetic zone-boundary における動的構造因子 [110]

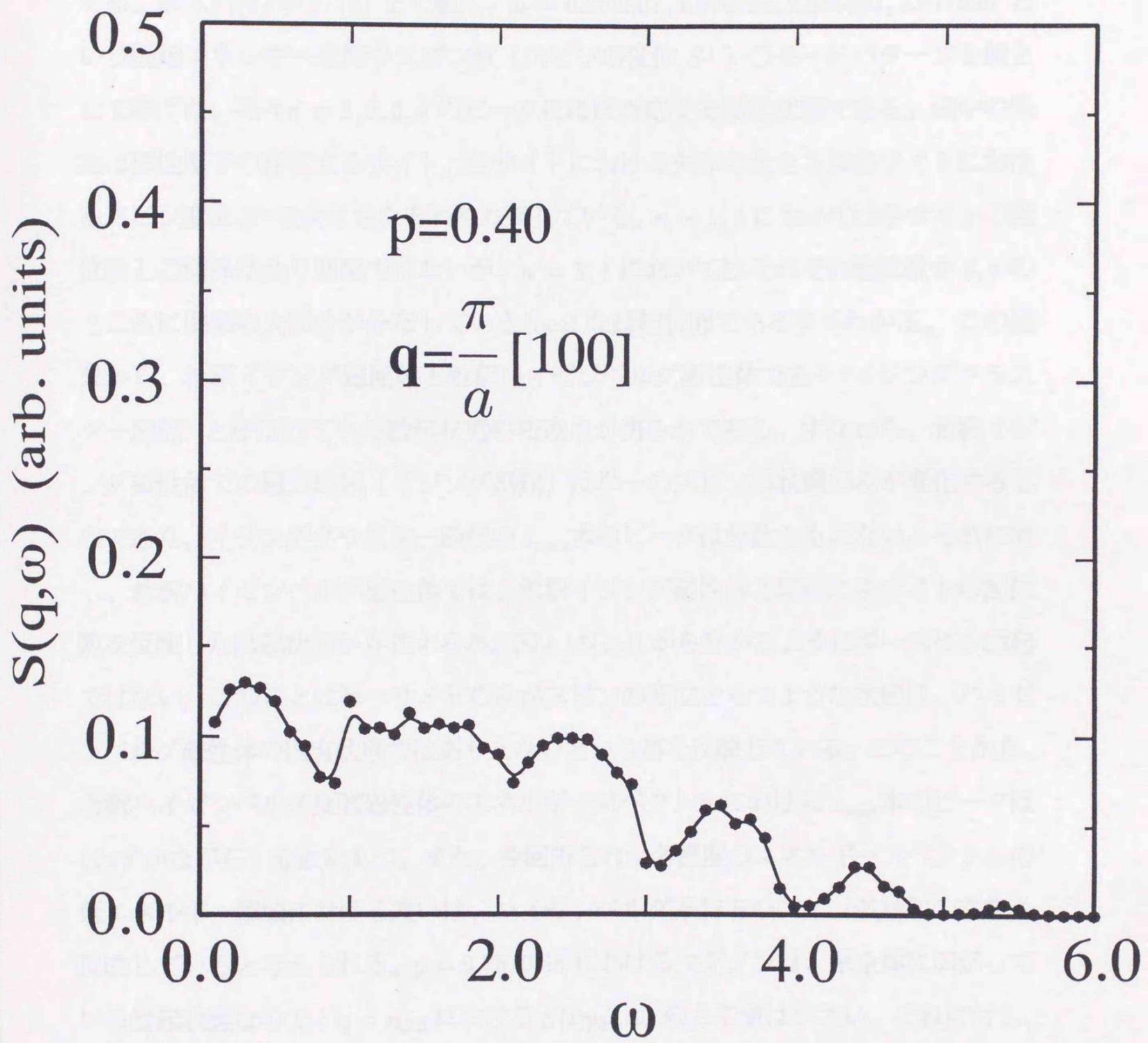
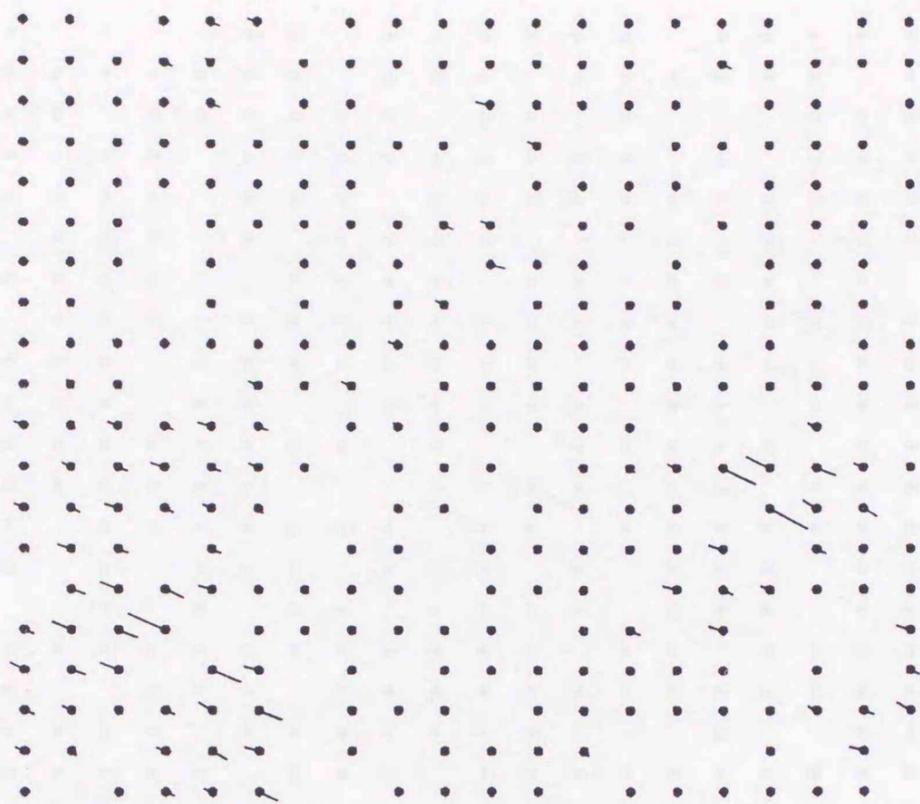


図 4. 14(c) $d=3, p=0.40$, magnetic zone-boundary における動的構造因子 [110]

のスピン波励起の各エネルギー領域におけるモードパターンを行列対角化の方法で調べた。その一例を図 4.15(a-d) に示す。系のサイズの 20×20 , $p = 0.75$ で計算したものである。この系は正方格子なので最大配位数は 4 であり、4 本のピークが存在する。図 4.15(a) から (d) まで順に、 $\omega = 0.960807, 1.874525, 2.886891, 3.877936$ という励起エネルギーを持つスピン波 (スピンの変位 S^+) のモードパターンを例として挙げた。各々 $n = 1, 2, 3, 4$ のピークにはほぼ対応する励起状態である。図中の黒丸は磁性原子の存在するサイト、各サイトにおける矢印の大きさは各サイトにおけるスピン変位 S^+ の大きさをそれぞれ表している。 $n = 1, 2$ においては各サイトの配位数との関係は余り明確ではないが、 $n = 3, 4$ においてはそれぞれ配位数が 3, 4 のところに振幅の大部分が分布している local な励起状態である事がわかる。この結果から、希釈イジング磁性体と希釈ハイゼンベルグ磁性体で各々“イジングクラスター励起”と呼ばれている励起状態の相違点が明らかである。すなわち、希釈イジング磁性体での磁気励起 (イジング励起) は単一のスピンの状態のみが変化するものであり、イジングクラスター励起の z_{\max} 本のピークは分散をもたない。それに対し、希釈ハイゼンベルグ磁性体では、希釈イジング磁性体と同様に各サイトの配位数を反映した励起状態が存在するが、図 4.15(c,d) から分かるように単一スピン励起ではない。このことは単一サイトのみがスピンの変位をもつような状態は、ハイゼンベルグ磁性体の固有状態ではありえないという事を反映している。このことから、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体のエネルギースペクトルにおける z_{\max} 本のピークは (わずかながら) 分散をもつ。また、今回得られた各濃度のエネルギースペクトルの低エネルギー領域における違いは、ハイゼンベルグ系特有のスピン波励起の存在を反映していると考えられる。 $p = 0.75, 0.65$ におけるマグノン は、系全体に広がっている励起状態なので、 $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{ZB}$ における $S(\mathbf{q}_{ZB}, \omega)$ のとる値は小さい。それに対し、 $p = 0.40$ では系の相関長 $\xi \approx 9a \gg a$ であり空間的に極めて強く局在しているフラクトンが存在すると考えられるので、 $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{ZB}$ においても $S(\mathbf{q}, \omega)$ に大きな寄与をな

(a) $\omega=0.960807$



(b) $\omega=1.874525$

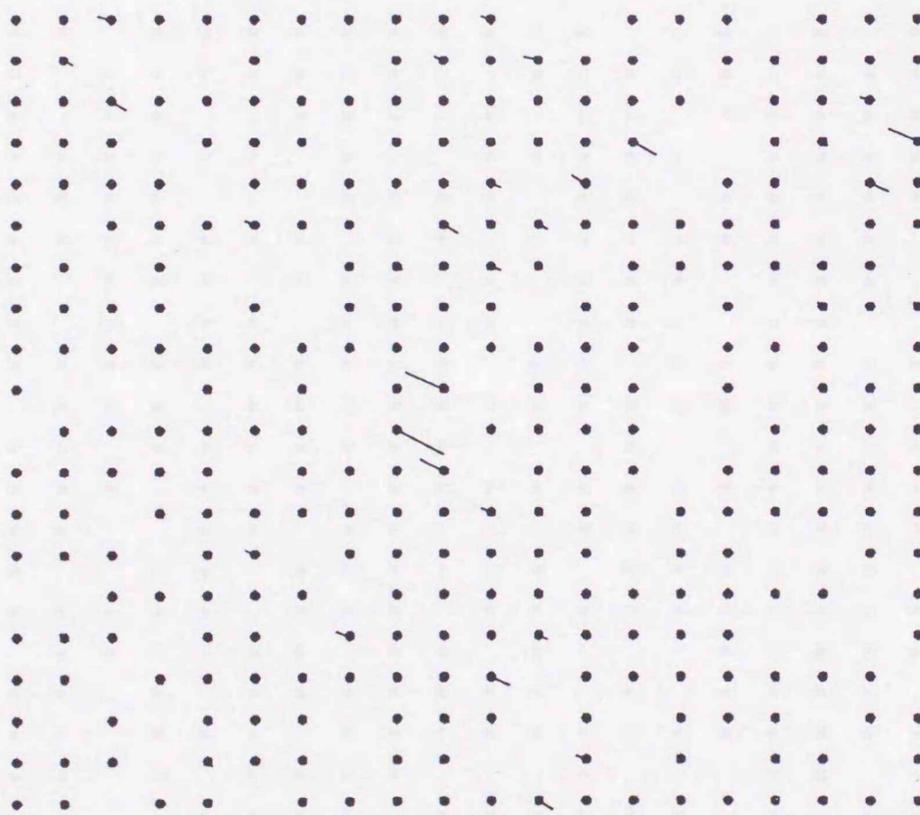
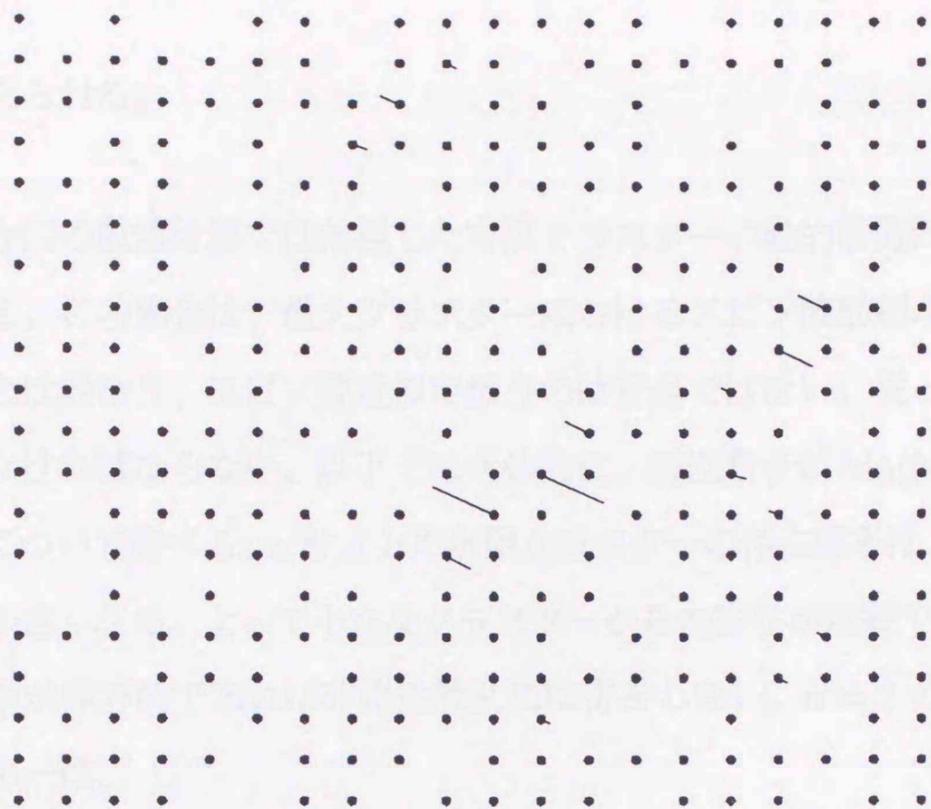


図 4. 15(a,b) Heisenberg 反強磁性体における励起状態のモードパターン ($p = 0.75$)

(c) $\omega=2.886891$



(d) $\omega=3.877936$

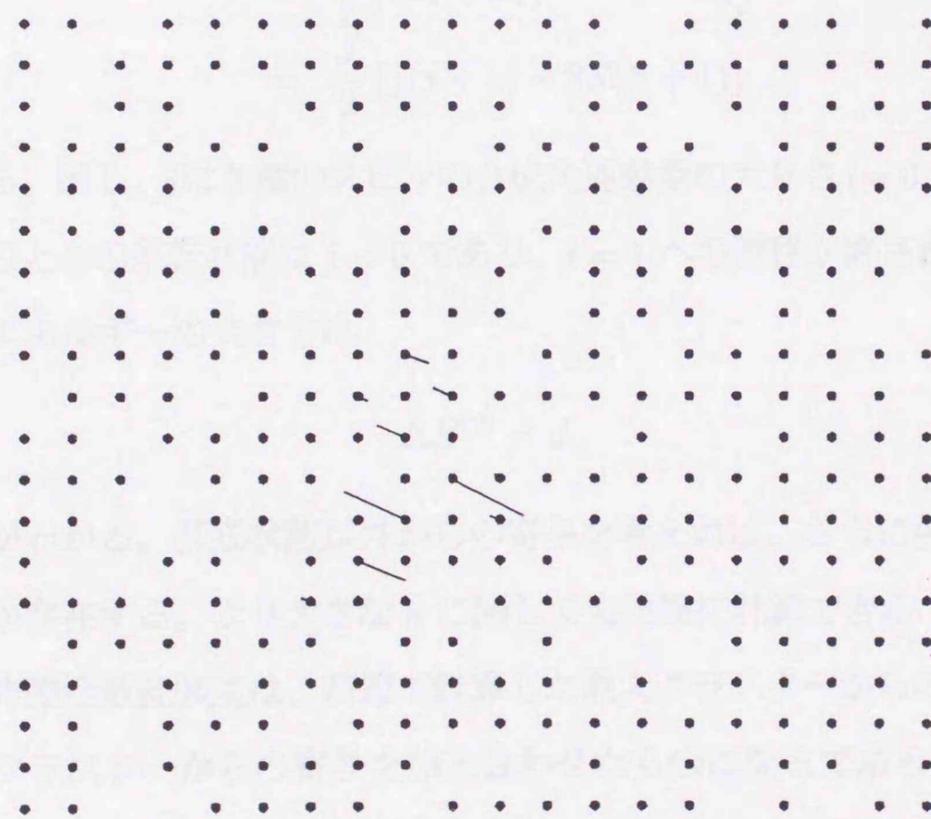


図 4. 15(c,d) Heisenberg 反強磁性体における励起状態のモードパターン ($p = 0.75$)

すものと考えられる。

最後に、今回の数値計算では無視した有限クラスターの動的構造因子への寄与について述べる。この場合は、最大クラスターにおけるスピン波励起からの寄与を取り扱う場合とは異なり、スピン波近似で扱うのは妥当ではない。従って量子力学的に取り扱わなければならない。以下では具体的に、磁性原子が $\text{Mn}(\text{Mn}^{2+}, S = 5/2)$ である場合について述べる。 n サイトの有限クラスターの存在確率は、 n の値が大きくなるほど小さくなる。よって小さなクラスターからの寄与が重要であろう。 $n = 1$ のときは、系が等方的であれば非弾性散乱には寄与しない。 $n = 2$ のときは、系の固有エネルギーは、

$$\begin{aligned} E &= JS_1 \cdot S_2 \\ &= \frac{J}{2} \{(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 - S_1^2 - S_2^2\} \\ &= \frac{J}{2} \{j(j+1) - 2S(S+1)\} \end{aligned} \quad (4.41)$$

と与えられる。但し、 j は 2 個のスピン合成角運動量の大きさ ($= 0, 1, \dots, 2S = 5$) である。このときの基底状態は $j = 0$ であり、 $j = 1$ への遷移が許される。よって励起 (遷移) エネルギーの大きさは

$$\Delta E^{(2)} = J \quad (4.42)$$

となることがわかる。基底状態以外からの寄与を考えれば、さらに多くの遷移エネルギー準位が存在する。より大きな n に関しても同様に計算できる [95]。よって現実の中性子非弾性散乱強度は、前節で計算した最大クラスターからの寄与に、このような孤立クラスターからの寄与を加え合わせたものになるであろう。実際には、濃度 p の関数として与えられる有限クラスターの存在確率は、 $p > p_c$ では非常に小さい。例えば、2 スピン・クラスターの出現確率 P_2 は $P_2 = 3p^2(1-p)^{10}$ である。有限クラスターのサイズが大きくなるにつれて、この出現確率は急激に小さくなる。

従って4.3節および4.4節で得られた結論は、系の濃度 p が臨界濃度 p_c に極めて近い場合 ($0 < p - p_c \ll 1$) を除けば、有限クラスターの存在によって大きな変化を受けないと考えられる。

なお今回の数値計算では無視されているが、スピンドYNAMICSを記述する運動方程式は本来は非線形である。現実の系は有限温度であり、スピン波間の相互作用が存在するが十分低温では線形スピン波近似は良い近似になっていると考えられる。Chen と Landau [114] は、spin-dynamics 法により非線形性をまともに取り入れた $S(\mathbf{q}, \omega)$ の計算を行っている。このような手法により、上記の結果がどのような影響を受けるかは非常に興味深い。

第5章 大規模数値計算アルゴリズム -強制振動子法の拡張-

5.1 非対称行列の固有値問題

固有値問題は、物理学の様々な分野に登場する。特に、大規模疎行列の固有値・固有ベクトルないし固有値密度分布の数値計算を要求される事が多い [115]。しかし、行列の次数が大きいと、通常の方法 (Householder 法、QR 法) [116,117] では必要なメモリー容量が非常に大きくなってしまいうため困難である。現在最も広く用いられているのは Lanczos 法であり、対角化すべき行列を書き換えなくて済むので、大規模疎行列の解法に適している [118]。但し通常の Lanczos 法は、行列の最大 (最小) 固有値から求めて行く手段であるため、行列の固有値列の任意の領域を調べるのは別の方法が必要である。その一つの方法として、強制振動子法 (forced oscillator method) が提唱されている [35,36]。この方法は、問題となる行列を係数行列としてもつような線形系を考え、そこにある振動数で周期的な外力を加える事により、外力振動数に近接した振動数をもつ固有モードが共鳴によって大きな振幅をもつようになる事を利用して、系の固有値密度分布あるいは固有値・固有ベクトルを求める方法である。今までに、様々な乱れた格子振動問題、光の局在 [37]、量子スピン系の比熱 [119]、非晶質遷移金属合金の電子構造 [120]、あるいは $\pm J$ イジングスピニングラスの問題 [121] などに適用されてきた。しかし、これらはすべて大規模対称 (エルミート) 行列を取り扱う問題である。しかし本論文で取り扱っている古典ハイゼンベルグ反強磁性体のダイナミカル・マトリックスは非対称行列であり、従来の強制振動子法で取り扱う事は困難であった。非対称行列の固有値問題は、ハイゼンベル

グ反強磁性体や、ハイゼンベルグスピングラスのような磁性体のダイナミクスを扱う上で登場する。従来非対称行列の固有値問題を取り扱う手法として、QR法およびダブルQR法や、Arnoldi法、非対称Lanczos法などがあるが、これらは上記の対称行列を扱う方法と同様の問題が存在する。もう一つの問題点として、非対称行列の固有値問題を扱うArnoldi法のような方法では、解の収束性が対称行列のそれと比べて余り良くない事が知られている。また一般に、非対称行列の固有値は、行列要素のわずかな変化に非常に敏感であるなど、独特の数値的困難が存在する [116]。

非対称行列の固有値は一般に複素数であるが、ここでは上記の反強磁性体におけるダイナミクスへの応用を考えているため、系の全固有値が実数値をとるような特別な場合に問題を限定する。このような行列の固有値問題においては固有ベクトル間の正規直交関係が存在しない為、従来の強制振動子法で取り扱うことは不可能であった。本節ではこのような問題への拡張について述べる [90]。また以下の説明では、問題となる行列 \mathbf{D} の行列要素がすべて実数（実非対称行列）であるとして議論を進めるが、この制約は本質的なものではない。何故ならば、詳細は文献 [116] の中に述べられているが、行列要素が複素数である N 次の固有値問題は、行列要素が実数である $2N$ 次の固有値問題に書き換える事が可能だからである。すなわち今回取り扱う系のように固有値 ω_λ が実数である場合、固有値問題

$$\mathbf{D}\mathbf{x}_\lambda = \omega_\lambda\mathbf{x}_\lambda \quad (5.1)$$

は、行列 \mathbf{D} と固有ベクトル \mathbf{x}_λ に関して各々

$$\mathbf{D} \equiv \mathbf{D}_R + i\mathbf{D}_I \quad (5.2a)$$

$$\mathbf{x}_\lambda \equiv \mathbf{x}_\lambda^R + i\mathbf{x}_\lambda^I \quad (5.2b)$$

と定義すると、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{D}_R & -\mathbf{D}_I \\ \mathbf{D}_I & \mathbf{D}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_\lambda^R \\ \mathbf{x}_\lambda^I \end{bmatrix} = \omega_\lambda \begin{bmatrix} \mathbf{x}_\lambda^R \\ \mathbf{x}_\lambda^I \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

と実数係数の $2N$ 次行列に関する固有値問題に変形できる。ここで元の (5.1) 式の固有値問題においては (当然 \mathbf{D} が正則行列という条件の下では) 一次独立な固有ベクトルが N 本存在する。それに対して、(5.3) 式の固有値問題においては、固有ベクトルが $2N$ 本存在する。この差異はどこから来たのであろうか? 実は、(5.3) 式の実数係数をもつ $2N$ 次行列の固有値問題では、すべての固有値が 2 重縮退しており、各々の固有値 ω_λ に対して

$$\mathbf{x}_\lambda^1 \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{x}_\lambda^R \\ \mathbf{x}_\lambda^I \end{pmatrix} \quad (5.4a)$$

$$\mathbf{x}_\lambda^2 \equiv \begin{pmatrix} -\mathbf{x}_\lambda^I \\ \mathbf{x}_\lambda^R \end{pmatrix} \quad (5.4b)$$

という、2つの固有ベクトルが存在する [116]。この2つの固有ベクトルは、 $2N$ 次元の実数線形空間においては一次独立だが、もとの N 次元の複素線形空間のベクトルとして見ると、 \mathbf{x}_λ^2 は \mathbf{x}_λ^1 が i 倍されたものに過ぎない。すなわちこの2つのベクトルは係数が異なるだけであり、固有ベクトルとしては全く同じものである。

一般に非対称 (非エルミート) 行列の固有値問題に関しては、1つの固有値に属する2通りの固有ベクトルが存在する。すなわち、

$$\omega_\lambda u_m(\lambda) = \sum_n D_{mn} u_n(\lambda) \quad (5.5a)$$

$$\omega_\lambda v_m(\lambda) = \sum_n v_n(\lambda) D_{nm} \quad (5.5b)$$

ここで、 $u_m(\lambda)$ は右固有ベクトル、 $v_m(\lambda)$ は左固有ベクトルと呼ばれる。対称 (エルミート行列) の場合は、この2つの固有ベクトルは一致する。このことは、(5.5a) 式を行列表示してその両辺の transpose をとると明らかである。ここで、 $|u(\lambda)\rangle$ ($\equiv (u_1(\lambda), u_2(\lambda), \dots)^T$) どうしあるいは $|v(\lambda)\rangle$ ($\equiv (v_1(\lambda), v_2(\lambda), \dots)^T$) どうしは互いに直交していないが、左右の固有ベクトル間には biorthogonality condition と呼ばれる関係が成立している [115, 122]。すなわち、

$$\langle v(\lambda) | u(\lambda') \rangle = \delta_{\lambda, \lambda'} \quad (5.6a)$$

$$\sum_{\lambda} |u(\lambda)\rangle\langle v(\lambda)| = \mathbf{I} \quad (5.6b)$$

ここで \mathbf{I} は単位行列である。ここで全固有値が正の値であるとしても一般性を失わない。何故ならば、問題となっている行列 D の対角成分に一定の正の値を加える事によって、すべての固有値を正にとることができるからである。即ち、

$$(\omega_{\lambda} + \omega_0)u_m(\lambda) = \sum_n (D_{mn} + \delta_{m,n}\omega_0)u_n(\lambda) \quad (5.7a)$$

$$(\omega_{\lambda} + \omega_0)v_m(\lambda) = \sum_n v_n(\lambda)(D_{nm} + \delta_{m,n}\omega_0) \quad (5.7b)$$

であるので、系の全固有値 ω_{λ} に関して $\omega_{\lambda} + \omega_0 > 0$ となるように ω_0 の値をとれば良い。そこで(5.7a,b)式を2階の微分方程式にマッピングする。

$$\frac{d^2}{dt^2}x_m(t) = -\sum_n D'_{mn}x_m(t) \quad (5.8a)$$

$$\frac{d^2}{dt^2}y_m(t) = -\sum_n D'_{nm}y_m(t) \quad (5.8b)$$

ここで、 $D'_{mn} \equiv D_{mn} + \delta_{m,n}\omega_0$ と定義した。また $x_m(t)$ 、 $y_m(t)$ は、それぞれ固有ベクトル $u_m(\lambda)$ と $v_m(\lambda)$ を固有モードとしてもつような線形系における m サイトの変位である。つまり $x_m(t)$ 、 $y_m(t)$ は

$$x_m(t) = \sum_{\lambda} P_{\lambda}(t)u_m(\lambda) \quad (5.9a)$$

$$y_m(t) = \sum_{\lambda} Q_{\lambda}(t)v_m(\lambda) \quad (5.9b)$$

と展開できる。ここで $P_{\lambda}(t)$ と $Q_{\lambda}(t)$ は各々 $u_m(\lambda)$ と $v_m(\lambda)$ の振幅であり、 $\sim e^{-i\mu_{\lambda}t}$ ($\mu_{\lambda}^2 \equiv \omega_{\lambda} + \omega_0$)という時間依存性をもつ。ここで、固有値密度分布の計算は以下のようにして行う。時間 $t=0$ で変位 $x_m(t)$ 、 $y_m(t)$ およびその時間に関する一回微分 $\dot{x}_m(t)$ 、 $\dot{y}_m(t)$ はゼロとする。そこで(5.8a,b)式の右辺に周期的な“外力”項 $F_m \cos(\Omega t)$ を加える。ここで各サイトの外力の振幅は

$$F_m = F_0 \cos(\phi_m) \quad (5.10)$$

とする。ただし ϕ_m は $0 \leq \phi_m < 2\pi$ で一様ランダムに与える。また F_0 は定数である。
次に以下のような量を定義する。

$$\begin{aligned}\tilde{E}(t) &\equiv \frac{1}{2} \left\{ \sum_m \dot{x}_m(t) \dot{y}_m(t) + \sum_m \sum_n y_m(t) D'_{mn} x_n(t) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_\lambda \left\{ \dot{P}_\lambda(t) \dot{Q}_\lambda(t) + \mu_\lambda^2 P_\lambda(t) Q_\lambda(t) \right\}\end{aligned}\quad (5.11)$$

ここで (5.11) 式の導出において (5.6a,b) 式で述べた biorthogonality conditions を用いた。また、 $\xi_\lambda(t) \equiv \dot{P}_\lambda(t) + i\mu_\lambda P_\lambda(t)$ 及び $\eta_\lambda(t) \equiv \dot{Q}_\lambda(t) + i\mu_\lambda Q_\lambda(t)$ という量を定義する。(5.8a,b) 式より、時間 T の間外力を加えた後の $\xi_\lambda(T)$ と $\eta_\lambda(T)$ は各々、

$$\begin{aligned}\xi_\lambda(T) &= \frac{e^{i\mu_\lambda T}}{2} \sum_m F_m v_m(\lambda) \left[\frac{e^{i(\Omega - \mu_\lambda)t}}{i(\Omega - \mu_\lambda)} - \frac{e^{-i(\Omega + \mu_\lambda)t}}{i(\Omega + \mu_\lambda)} \right]_0^T \\ &\approx \frac{e^{i\mu_\lambda T}}{2} \left\{ \sum_m F_m v_m(\lambda) \right\} \frac{e^{i(\Omega - \mu_\lambda)T} - 1}{i(\Omega - \mu_\lambda)}\end{aligned}\quad (5.12a)$$

$$\eta_\lambda(T) \approx \frac{e^{i\mu_\lambda T}}{2} \left\{ \sum_m F_m u_m(\lambda) \right\} \frac{e^{i(\Omega - \mu_\lambda)T} - 1}{i(\Omega - \mu_\lambda)}\quad (5.12b)$$

となる。ここで $\Omega \approx \mu_\lambda$ からの寄与が相対的にずっと大きいので、(5.12a) 式の 2 項目の $\Omega \approx -\mu_\lambda$ からの寄与は無視できる。また (5.11) 式は、 $\xi_\lambda(t)$, $\eta_\lambda(t)$ を用いて

$$\begin{aligned}\tilde{E}(t) &= \frac{1}{2} \sum_\lambda \xi_\lambda^*(t) \eta_\lambda(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_\lambda \left\{ \sum_m F_m v_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \frac{\sin^2 \{(\mu_\lambda - \Omega)T/2\}}{(\mu_\lambda - \Omega)^2}\end{aligned}\quad (5.13)$$

と書き直せる。ここで ϕ_m に関して平均をとることにより、

$$\begin{aligned}\langle \tilde{E}(T) \rangle &= \frac{1}{2} \sum_\lambda \frac{\sin^2 \{(\mu_\lambda - \Omega)T/2\}}{(\mu_\lambda - \Omega)^2} \left\langle \sum_m \sum_n v_m(\lambda) u_n(\lambda) \cos(\phi_m) \cos(\phi_n) \right\rangle \\ &\approx \frac{F_0^2}{4} \sum_\lambda \frac{\sin^2 \{(\mu_\lambda - \Omega)T/2\}}{(\mu_\lambda - \Omega)^2}\end{aligned}\quad (5.14)$$

となる。ここで $\langle \dots \rangle$ は ϕ_m に関するランダム位相平均であり、その結果 (5.14) 式の右辺においては $m = n$ の項のみが残る。ここで、

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha T}{\pi T \alpha^2} = \delta(\alpha)\quad (5.15)$$

という関係式を利用する。 $\alpha \neq 0$ のとき、上式の左辺は明らかにゼロとなる。また $\alpha = 0$ のときは、ロピタルの定理より

$$\begin{aligned}
 \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\sin^2(\alpha T)}{\pi T \alpha^2} &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \{\sin^2(\alpha T)\}}{\frac{\partial}{\partial \alpha} (\pi T \alpha^2)} \\
 &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2T \sin(\alpha T) \cos(\alpha T)}{2\pi T \alpha} \\
 &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \{T \sin(2\alpha T)\}}{\frac{\partial}{\partial \alpha} (2\pi T \alpha)} \\
 &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2T^2 \cos(2\alpha T)}{2\pi T} \\
 &= \frac{T}{\pi} \tag{5.16}
 \end{aligned}$$

であるから、 $T \rightarrow \infty$ という極限では無限大となる。また、 α について $-\infty$ から ∞ の範囲で積分を行うと、

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\alpha T)}{\pi T \alpha^2} d\alpha &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(x)}{x^2} dx \\
 &= 1 \tag{5.17}
 \end{aligned}$$

となり、(5.15) 式の左辺は δ -関数を定義するための全ての要求を実際に満たしている。ここで $x \equiv \alpha T$ とおいた。上式で $\alpha = \mu_\lambda - \Omega$ とおき、時間 T を十分長く与えることにより (5.14) 式は、

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{E}(T, \Omega) \rangle &\approx \frac{\pi T F_0^2}{8} \sum_{\lambda} \delta(\mu_\lambda - \Omega) \\
 &= \frac{\pi T N F_0^2}{8} \mathcal{D}(\Omega) \tag{5.18}
 \end{aligned}$$

となることが分かる。ここで $\mathcal{D}(\Omega)$ はマッピングされた系における規格化された状態密度である。今実際に求めたいのは、元の行列 $\{D_{mn}\}$ の固有値密度分布 $\mathcal{D}(\omega)$ であるので、これは

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}(\omega) &= \left| \frac{d\mu(\omega)}{d\omega} \right| \tilde{\mathcal{D}}(\mu) \\
 &= \frac{4}{\pi T N F_0^2 \sqrt{\omega + \omega_0}} \langle E(T, \mu(\omega)) \rangle \tag{5.19}
 \end{aligned}$$

として得られる [90]。この左辺は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{D}(\omega) d\omega = 1$$

という条件をみたす、規格化された状態密度である。

ここで外力時間 T の大きさをどのように与えるかについて考えてみよう。いま、 $\delta\omega$ という分解能で状態密度を計算したいとしよう。これに対応する、マッピングされた系での共鳴幅 $\delta\mu$ は、

$$\delta\mu \approx \left| \frac{d\mu(\omega)}{d\omega} \right| \delta\omega \quad (5.20)$$

と与えられる。式 (5.12) より、共鳴幅 $\delta\mu$ は、外力時間 T に反比例しており、 $\delta\mu \approx 4\pi/T$ という関係にある。よって、 ω において $\delta\omega$ という分解能をもつ固有値密度分布を得ようとするならば、

$$\begin{aligned} T &\approx 4\pi / \{|d\mu(\omega)/d\omega| \delta\omega\} \\ &= 8\pi \sqrt{\omega + \omega_0} / \delta\omega \end{aligned}$$

だけの外力時間を与えればよい。また、現実の計算では、時間ステップ τ は $\mu_{\max}\tau (= \sqrt{\omega_{\max} + \omega_0}\tau) < 2$ を満たすようにとらねばならない。何故ならば、これよりも時間ステップ τ を大きくとると、オイラー法による系の時間発展を正確に追うことが不可能になるからである [35, 123]。計算に必要な CPU タイムは全ステップ数 T/τ に比例するので、 ω_0 というパラメータは可能な限り小さくとったほうが効率よく計算できるという事がわかる。また、注意しなければならないのは、 $\delta\omega$ は系の固有値間隔 $\Delta\omega (\approx 1/ND(\omega))$ よりも十分大きくなければならない事である。

上記の数値計算法の有効性及び計算精度を検証するために、2次元の規則的な正方格子上的反強磁性スピン波の固有値密度分布を求め、厳密解を比較した結果を図 5.1 に示す [90]。システムサイズは 840×840 で、周期境界条件下により計算した。

図中の黒丸が強制振動子法による計算結果、実線が厳密解であり、非常によく一致していることが分かる。ただし図 5.1 および第 3 章での反強磁性スピン波の状態密度の計算において、加える外力振幅 F_m のとり方は (5.10) 式で説明したのとは多少異なり、 $F_m = \sigma_\alpha F_0 \cos(\phi_i)$ としている。ここで、 i は m サイトの属する反強磁性体のユニットセルをあらわしており、 $\alpha (= \uparrow, \downarrow)$ は各ユニットセルにおける sublattice を指定するものである。また ϕ_i は $0 \leq \phi_i < 2\pi$ の範囲で一様ランダムとした。このような F_m の選び方により、(5.13) 式における $\{\dots\}\{\dots\}$ の積は、

$$\begin{aligned} \left\{ \sum_m F_m v_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} &= \sum_i \sum_\alpha F_{i\alpha}^2 v_{i\alpha}(\lambda) u_{i\alpha}(\lambda) \\ &+ \sum_i \sum_\alpha \sum_{\beta(\neq\alpha)} F_{i\alpha} F_{i\beta} v_{i\alpha}(\lambda) u_{i\beta}(\lambda) \\ &+ \sum_i \sum_{j(\neq i)} \sum_\alpha \sum_\beta F_{i\alpha} F_{j\beta} v_{i\alpha}(\lambda) u_{j\beta}(\lambda) \quad (5.21) \end{aligned}$$

但し m サイトは $(i\alpha)$ 、 n サイトは $(j\beta)$ という対応関係にある。ここで、上式の右辺の第 3 項は ϕ_i に関するランダム位相平均をとると消える。また、第 2 項は

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_\alpha \sum_{\beta(\neq\alpha)} F_{i\alpha} F_{i\beta} v_{i\alpha}(\lambda) u_{i\beta}(\lambda) \\ = -F_0^2 \sum_i \cos^2(\phi_i) \{v_{i\alpha=\uparrow}(\lambda) u_{i\alpha=\downarrow}(\lambda) + v_{i\alpha=\downarrow}(\lambda) u_{i\alpha=\uparrow}(\lambda)\} \end{aligned}$$

となり、この式の $\{\dots\}$ の中は、後で (5.58) 式で示される $u_n(\lambda)$ と $v'_n(\lambda) = \sigma_n v_n(\lambda)$ の間の関係式から 0 になる事が分かる。従って、(5.21) 式でランダム位相平均をとった結果は、

$$\begin{aligned} \left\langle \left\{ \sum_m F_m v_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \right\rangle &= \left\langle F_0^2 \sum_i \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \cos^2(\phi_i) v_{i\alpha}(\lambda) u_{i\alpha}(\lambda) \right\rangle \\ &= \frac{F_0^2}{2} \quad (5.22) \end{aligned}$$

となり、このような外力振幅 F_m のとり方をしても、(5.18) 式と同様の結果が得られる事が分かる。本論文中で、反強磁性スピン波の状態密度を計算する際に $F_m =$

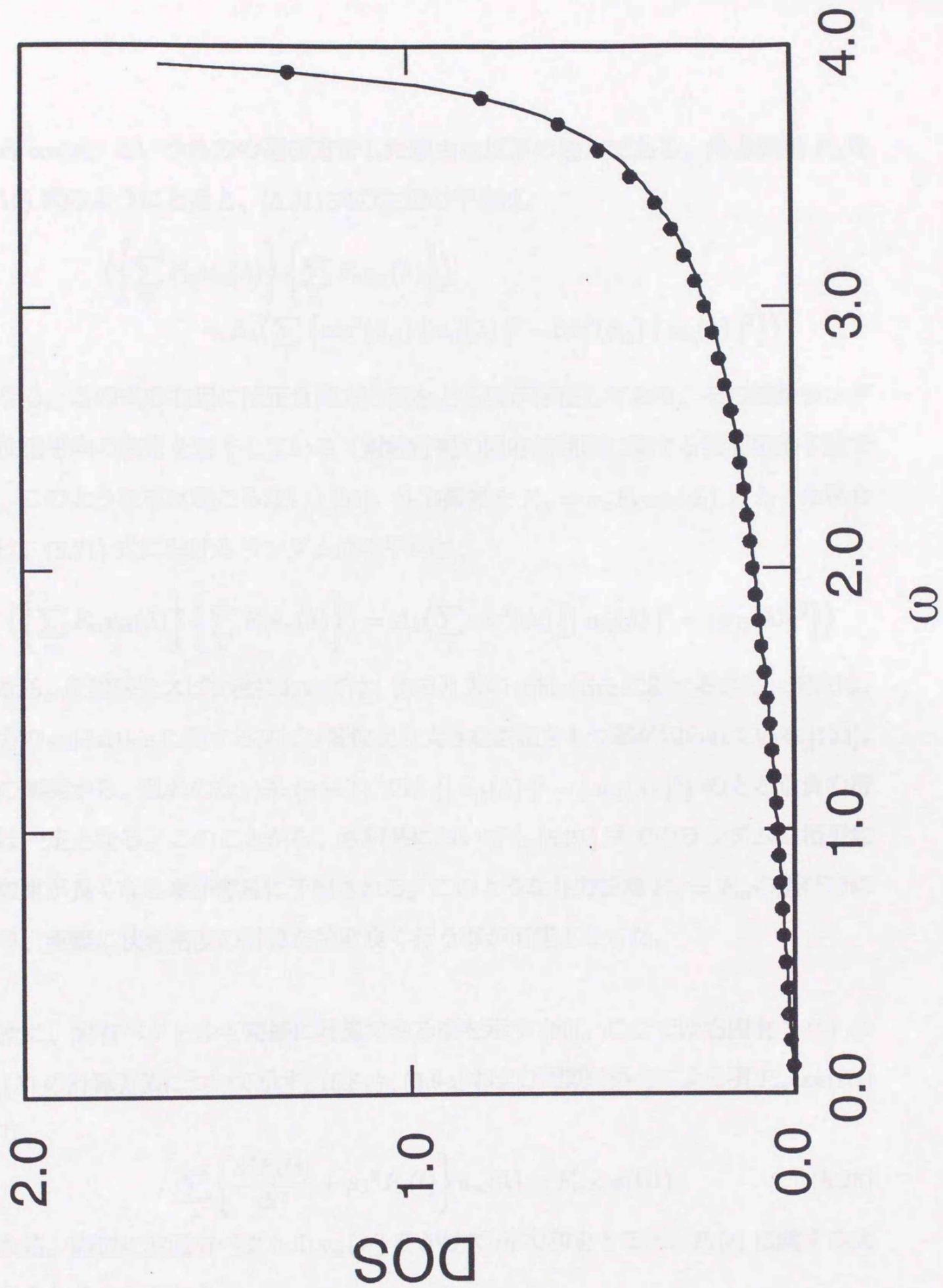


図 5. 1 $d=2$ 古典ハイゼンベルグ反強磁性体 ($p=1$) のスピン波状態密度 [90]

$\sigma_\alpha F_0 \cos(\phi_i)$ という外力の選び方をした理由は以下の通りである。外力振幅 F_m を (5.10) 式のようにとると、(5.21) 式の左辺の平均は、

$$\begin{aligned} & \left\langle \left\{ \sum_m F_m v_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \right\rangle \\ & = A_\lambda \left\langle \sum_i \left\{ \cos^2(\phi_{i\uparrow}) |u_{i\uparrow}(\lambda)|^2 - \cos^2(\phi_{i\downarrow}) |u_{i\downarrow}(\lambda)|^2 \right\} \right\rangle \end{aligned}$$

となる。この式の右辺には正負両方の値をとる項が存在しており、その結果ランダム位相平均の収束を悪くしている（対称行列の固有値問題に関する強制振動子法では、このような事は起こらない）[90]。外力振幅を $F_{i\alpha} = \sigma_\alpha F_0 \cos(\phi_i)$ ととった場合には、(5.21) 式におけるランダム位相平均は、

$$\left\langle \left\{ \sum_m F_m v_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \right\rangle = A_\lambda \left\langle \sum_i \cos^2(\phi_i) \left\{ |u_{i\uparrow}(\lambda)|^2 - |u_{i\downarrow}(\lambda)|^2 \right\} \right\rangle$$

となる。反強磁性スピン波においては、ある片方の sublattice に属するスピン変位は、他方の sublattice に属するスピン変位より大きな振幅をもつ事が知られている [124]。この事実から、乱れの無い系 ($p=1$) では $\{|u_{i\uparrow}(\lambda)|^2 - |u_{i\downarrow}(\lambda)|^2\}$ のとる正負の符号は一定となる。このことから、希釈系においても (5.21) 式でのランダム位相平均の収束が良くなる事が容易に予想される。このような外力振幅 $F_m = F_{i\alpha}$ の選び方により、実際に状態密度の計算を精度良く行う事が可能となった。

次に、固有ベクトルも同様に計算できる事を示す [90]。ここでは右固有ベクトル $u_m(\lambda)$ の計算方法について示す。(5.8a)、(5.9a) および周期的外力による項 $F_m \cos(\Omega t)$ より、

$$\sum_\lambda \left\{ \frac{d^2 P_\lambda(t)}{dt^2} + \mu_\lambda^2 P_\lambda(t) \right\} u_m(\lambda) = F_m \cos(\Omega t) \quad (5.23)$$

となる。両辺に左固有ベクトル $v_m(\lambda')$ をかけて m で和をとると、 $P_\lambda(t)$ に関する式が得られる。すなわち、

$$\frac{d^2 P_\lambda(t)}{dt^2} + \mu_\lambda^2 P_\lambda(t) = \sum_m \{F_m v_m(\lambda)\} \cos(\Omega t) \quad (5.24)$$

ここで $P_\lambda(t=0) = 0$ という初期条件から、 $P_\lambda(t)$ は

$$P_\lambda(t) = \left\{ \sum_m F_m v_m(\lambda) \right\} \frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_\lambda)t/2\} \sin \{(\Omega - \mu_\lambda)t/2\}}{\Omega^2 - \mu_\lambda^2} \quad (5.25)$$

となる。よって T 時間だけ外力を加えた後の m サイトの変位 $x_m(t)$ は、式 (5.9a) より

$$x_m(T) = \sum_\lambda \left\{ \sum_n F_n v_n(\lambda) \right\} \frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_\lambda)T/2\} \sin \{(\Omega - \mu_\lambda)T/2\}}{\Omega^2 - \mu_\lambda^2} u_m(\lambda) \quad (5.26)$$

が得られる。ここで外力時間 T を十分長くすると、外力振動数 Ω に十分近い固有振動数 μ_λ をもつ少数のモードのみが大きな振幅をもつようになる。固有ベクトルの収束を早めるため、最初は一様ランダムに与えていた外力の振幅を

$$F_m = x_m(T) \quad (5.27)$$

と置き換え、 $t=0$ における初期条件を $x_m(t=0) = \dot{x}_m(t=0) = 0$ とした上で、再び強制外力を加えながら時間発展を追う。このような手続きを p 回繰り返した後の変位は、

$$x_m^{(p)}(T) = \sum_\lambda \left\{ \sum_n F_n v_n(\lambda) \right\} \left[\frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_\lambda)T/2\} \sin \{(\Omega - \mu_\lambda)T/2\}}{\Omega^2 - \mu_\lambda^2} \right]^p u_m(\lambda) \quad (5.28)$$

となる。十分 p の値が大きければ、ただ一つの固有モード λ_1 ($\mu_{\lambda_1} \approx \Omega$) のみが他の固有モードに比べて大きな振幅をもつ。すなわち、

$$x_m^{(p)}(T) \approx C u_m(\lambda_1) \quad (5.29)$$

(C は定数) となる。

次に、このようにして得られた右固有ベクトル $u_m(\lambda_1)$ に関する固有値は、以下のようにして評価できる。以下、 a_m, b_m という量を

$$a_m = \sum_n D'_{mn} x_n^{(p)}(T) \quad (5.30)$$

$$b_m = x_m^{(p)}(T) \quad (5.31)$$

と定義する。また m サイトにおける残差 δ_m を、

$$\delta_m \equiv a_m - \tilde{\mu}^2 b_m \quad (5.32)$$

と定義する。ここで $\tilde{\mu}$ は後で定義される量である。ここでもし $x_m^{(p)}$ が λ_1 モードの真の固有ベクトル $u_m(\lambda_1)$ に等しく $\tilde{\mu} = \mu_{\lambda_1}$ であったとしたら、(5.32) 式の δ_m はすべての m に関して $\delta_m = 0$ となる。そこで固有ベクトル計算の収束の目安として δ という量を

$$\delta^2 \equiv \frac{\sum_m \delta_m^2}{\sum_m a_m^2} \quad (5.33)$$

として定義する。上に述べたことから、固有ベクトルが収束すると $\delta \rightarrow 0$ となる事がわかる。 $\tilde{\mu}$ はこの δ を最も小さくする条件 ($\partial(\delta^2)/\partial\tilde{\mu} = 0$) で与えられる。すなわち、

$$\tilde{\mu}^2 \equiv \frac{\sum_m a_m b_m}{\sum_m b_m^2} \quad (5.34)$$

このときの δ の大きさは

$$\delta^2 = 1 - \frac{(\sum_m a_m b_m)^2}{(\sum_m a_m^2)(\sum_m b_m^2)} \quad (5.35)$$

で与えられる。もし上記の手順で計算された $x_m^{(p)}(t)$ について δ の値が非常に小さければ、 $x_m^{(p)}(t)$ は右固有ベクトル $u_m(\lambda_1)$ に非常に良く収束しているといえる。このとき、求められた右固有ベクトルに属する固有値の値は、 $\tilde{\omega}_{\lambda_1} = \tilde{\mu}^2 - \omega_0$ で与えられる。左固有ベクトル $v_m(\lambda)$ に関しても同様にして求める事ができる。すなわち、運動方程式

$$\frac{d^2}{dt^2} y_m(t) = - \sum_n D'_{nm} y_n(t) + F_m \cos(\Omega t) \quad (5.36)$$

の時間発展を (5.23) 式以下と同様に計算する事により、

$$\begin{aligned} y_m^{(p)}(T) &= \sum_{\lambda} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \left[\frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_{\lambda})T/2\} \sin \{(\Omega - \mu_{\lambda})T/2\}}{\Omega^2 - \mu_{\lambda}^2} \right]^p v_m(\lambda) \\ &\approx C' v_m(\lambda_1) \end{aligned} \quad (5.37)$$

(C' は定数)として得ることが出来る。

上記の数値計算を行う上で要する CPU タイムは反復回数 p と外力時間 T の積で決まるが、固有値・固有ベクトルを計算する際の適切な外力時間 T はどの程度であろうか。対称行列の固有値問題に関しては文献 [36] 中において考察されているが、以下では本節で述べた非対称行列の固有値問題に関する外力時間 T の最適な条件に関して述べる [90]。この場合、左右それぞれの固有ベクトル間における直交性が成立していないので、議論はずっと複雑になる。(5.28) 式および (5.37) 式において、固有ベクトルの収束性を決めているのはどちらも時間依存性をもつ

$$\left[\frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_\lambda)T/2\} \sin \{(\Omega - \mu_\lambda)T/2\}}{\Omega^2 - \mu_\lambda^2} \right]^p$$

の部分である。従って左右固有ベクトルに関する収束条件はどちらも同じであるとしてよい。ここで δ' という量を

$$\delta'^2 \equiv \frac{\sum_m \delta_m \tilde{\delta}_m}{\sum_m a_m \tilde{a}_m} \quad (5.38)$$

として定義する。ここで a_m と δ_m は各々 (5.30) 式および (5.32) 式で定義された量である。また \tilde{a}_m と $\tilde{\delta}_m$ は、

$$\tilde{a}_m \equiv \sum_n D'_{nm} \tilde{b}_n \quad (5.39)$$

および

$$\tilde{\delta}_m \equiv \tilde{a}_m - \tilde{\mu}^2 \tilde{b}_m \quad (5.40)$$

として与えられる量である。ただし、 $\tilde{b}_m = y_m^{(p)}(T)$ は (5.37) 式において時間 T だけ周期的外力を加え、外力 F_m を更新するということを p 回繰り返す事によって得られる m サイトの変位である。ここで δ' は固有ベクトルの収束の目安となる量であるが、(5.33) 式で定義された δ とは異なるものである。ここで $\tilde{\Gamma}_0, \tilde{\Gamma}_2, \tilde{\Gamma}_4$ を各々

$$\tilde{\Gamma}_0 \equiv \sum_m b_m \tilde{b}_m \quad (5.40a)$$

$$\tilde{\Gamma}_2 \equiv \sum_m a_m \tilde{b}_m \quad (5.40b)$$

$$\tilde{\Gamma}_4 \equiv \sum_m a_m \tilde{a}_m \quad (5.40c)$$

として定義すると、(5.38) 式は

$$\delta'^2 = (\tilde{\Gamma}_4 - 2\tilde{\mu}^2\tilde{\Gamma}_2 + \tilde{\mu}^4\tilde{\Gamma}_0)/\tilde{\Gamma}_4 \quad (5.41)$$

として書き直す事ができる。ここで、

$$\tilde{\Gamma}_n = \sum_\lambda \mu_\lambda^n P_\lambda(T) Q_\lambda(T) \quad (5.42)$$

という関係式が成り立つ。ここで外力時間 T が十分大きく、 p 回の外力の反復の後に各サイトの変位 $x_m^{(p)}(T)$ (および $y_m^{(p)}(T)$) が $\lambda = 1, 2$ という 2 個のモードからなっているという近似の下で、

$$\tilde{\mu}^2 = \frac{\mu_1^2 P_1 Q_1 + \mu_2^2 P_2 Q_2}{P_1 Q_1 + P_2 Q_2} \quad (5.43)$$

および

$$\delta'^2 = \frac{P_1 P_2 Q_1 Q_2 (\mu_1^2 - \mu_2^2)}{(P_1 Q_1 + P_2 Q_2) (\mu_1^4 P_1 Q_1 + \mu_2^4 P_2 Q_2)} \quad (5.44)$$

が成り立つ事が分かる。ここで (マッピングされた系における) 固有値間隔 $\Delta\mu \equiv |\mu_1 - \mu_2|$ が $\Delta\mu \ll \mu_1$ を満たし、 $P_1 \gg P_2 (Q_1 \gg Q_2)$ という条件の下で、 δ' という量は

$$\delta' \approx \frac{2\Delta\mu}{\tilde{\mu}} \left(\frac{P_2 Q_2}{P_1 Q_1} \right)^{1/2} \quad (5.45)$$

と書ける事が分かる。この式から、 $P_\lambda(t)$ と $Q_\lambda(t)$ に関する表式を用いて、

$$\log \delta' \approx p \log \left| \frac{h(\Omega, \mu_2; T)}{h(\Omega, \mu_1; T)} \right| + \log \left| \frac{2\Delta\mu}{\tilde{\mu}} \sqrt{\frac{\{\sum_m F_m v_m(\lambda_2)\} \{\sum_n F_n u_n(\lambda_2)\}}{\{\sum_m F_m v_m(\lambda_1)\} \{\sum_n F_n u_n(\lambda_1)\}}} \right| \quad (5.46)$$

という関係式が成立する。ここで、 $h(\Omega, \mu_\lambda; T)$ を

$$h(\Omega, \mu_\lambda; T) \equiv \frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_\lambda)T/2\} \sin \{(\Omega - \mu_\lambda)T/2\}}{\Omega^2 - \mu_\lambda^2} \quad (5.47)$$

として定義した。(5.46)式における右辺第2項目は、外力時間 T というパラメーターにはよらない。よって、ある与えられた $\delta' = \delta'_0$ に対する反復回数 p と外力時間 T の関係式は、

$$p \approx \log \left| \frac{\tilde{\mu} \delta'_0}{2\Delta\mu} \sqrt{\frac{\{\sum_m F_m v_m(\lambda_1)\} \{\sum_n F_n u_n(\lambda_1)\}}{\{\sum_m F_m v_m(\lambda_2)\} \{\sum_n F_n u_n(\lambda_2)\}}} \right| / \log \left| \frac{h(\Omega, \mu_2; T)}{h(\Omega, \mu_1; T)} \right| \quad (5.48)$$

として与えられる。この結果から、反復回数 p が少なく済むのは、 $|\sin\{(\Omega - \mu_1)T/2\}| \approx 1$ (及び $|\sin\{(\Omega - \mu_2)T/2\}| \approx 0$) という条件が満たされているときであろう。実際には、固有値・固有ベクトルの計算を行う前に μ_1 および μ_2 の正確な値を知る事は不可能であるが、 $\Omega - \mu_1$ の大きさはほぼ固有値間隔 $\Delta\mu$ と同程度であると考えられる。従って、このような条件下で最も短い外力時間 T は、

$$T \sim \frac{\pi}{\Delta\mu} \quad (5.49)$$

として与えられる。すなわち外力時間 T に対応する共鳴幅 $\delta\mu \sim \pi/T$ が、固有値間隔 $\Delta\mu$ と同じオーダーである($\delta\mu \sim \Delta\mu$)というのが望ましい条件であると考えられる[90]。これはいいかえると、共鳴幅の中に1個程度の固有値が含まれているという条件であり、物理的にも妥当である。

5.2 動的構造因子

前節で述べた強制振動子法は、前節でも述べたようにおもに固有値問題に対する数値計算法として用いられてきた。しかし現実の物性物理学の問題においては、状態密度(いわゆる“one-particle property”)にとどまらず、帯磁率や光学伝導度等の実験的に観測される量を調べるために、動的相関関数(“two-particle property”)

を直接評価しなければならない場合が極めて多い。本節では、動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ の数値計算法について述べる [90]。具体的には4章に登場した反強磁性スピン波の $S(\mathbf{q}, \omega)$ の具体的な数値計算法について述べる。この拡張によって、従来行列対角化の方法では計算できなかったような大きな系、特に3次元系を容易に取り扱う事が可能となった。また、本方法と同程度のメモリ容量でよい数値計算法として、equation of motion 法がある [94, 95, 125]。この方法は、初期条件はランダムに与えて系の時間発展を追い、時間相関関数を直接計算してから時間フーリエ変換を行ってエネルギースペクトルを求める方法である。現実の数値計算においては $t = 0$ から $t = \infty$ まで数値積分を行うわけにはゆかないので、積分の上限を有限の時間 $t = T$ で打ち切らなければならない。このことによりスペクトルが負の値をとったり、本来あるべきではないところが振動したり、というような誤差が生ずる。このような問題点を軽減するため、時間相関関数に damping 項 $\sim \exp\{-(t/T)^2\}$ (または $\sim \exp\{-(t/T)\}$) を付加して時間フーリエ変換を行ったり [94, 95]、あるいは Hanning ウィンドウ処理を行う [126]、という事がなされている。しかしこれら一連の操作によってもたらされる数値的な誤差がどの程度であるのかを見積もるのは、実際には非常に困難である。強制振動子法によると数値計算で得られるスペクトル (例. $S(\mathbf{q}, \omega)$ の ω 依存性) をある有限のエネルギー幅の中で平均化するという操作が極めて自然に行える点が長所である。

線形化された反強磁性スピン波の運動方程式は式 (3.31) でも述べたように、

$$i \frac{\partial}{\partial t} S_m^+(t) = \sigma_m \sum_n J_{mn} \{S_m^+(t) + S_n^+(t)\} \quad (5.50)$$

である。ここで $S_m^+(t)$ は、 m サイトにおけるスピンの変位の大きさであり、 σ_m は m サイトが up-spin サイトの時は+1、down spin サイトの時は-1 という値をとる。こ

ここで式(5.50)は、

$$\omega_\lambda u_m(\lambda) = \sum_n D_{mn} u_n(\lambda) \quad (5.51)$$

と書き直せる。但しダイナミカル・マトリックス D_{mn} の定義は(4.33)式で与えられている。反強磁性スピン波の動的構造因子は4.2節で述べたように、固有ベクトル $u_m(\lambda), v_m(\lambda)$ を用いて

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}, \omega) &= \langle n+1 \rangle \chi''(\mathbf{q}, \omega) \\ &= \langle n+1 \rangle \frac{\pi}{V} \sum_\lambda \delta(\omega - \omega_\lambda) \left\{ \sum_m e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} \sigma_m v_m(\lambda) \right\} \\ &\quad \times \left\{ \sum_n e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} u_n(\lambda) \right\} \end{aligned} \quad (5.52)$$

と表される。ここで $\langle n+1 \rangle = \{1 - \exp(-\beta\omega)\}^{-1}$ は Bose 因子であり、 $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ は一般化帯磁率の虚数部分である。また \mathbf{R}_m は m サイトの位置ベクトルであり、 $v'_m(\lambda)$ は行列 $\{D_{mn}\}$ の左固有ベクトル $v_m(\lambda)$ により、 $v'_m(\lambda) \equiv \sigma_m v_m(\lambda)$ と定義されたベクトルである。ここで、 $v'_m(\lambda) = A_\lambda u_m(\lambda)$ (A_λ は λ に依存する定数) という性質がある事を示す。固有値方程式(5.5a)より、

$$\mathbf{D}\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}, \quad (5.53)$$

及び左固有ベクトルに関する式(5.3b)より

$$(\mathbf{U}^{-1})\mathbf{D} = \mathbf{\Lambda}(\mathbf{U}^{-1}) \quad (5.54)$$

ただしここで記号 $\mathbf{U}, \mathbf{\Lambda}$ を

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \omega_1 & & 0 \\ & \omega_2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U} \equiv (|u(\lambda_1)\rangle, |u(\lambda_2)\rangle, \dots)$$

$(|u(\lambda_i)\rangle \equiv (u_1(\lambda_i), u_2(\lambda_i), \dots)^T)$ と定義した。また左右固有ベクトルの直交性から、

$$\mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \langle v(\lambda_1)| \\ \langle v(\lambda_2)| \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.55)$$

$(\langle v(\lambda_i)| \equiv (v_1(\lambda_i), v_2(\lambda_i), \dots))$ が成立している。ここで、ダイナミカル・マトリックス $(\mathbf{D})_{mn} = D_{mn}$ 及び $(\hat{\sigma})_{mn} \equiv \delta_{m,n}\sigma_m$ の定義より、(5.54) 式は

$$(\hat{\sigma}\mathbf{D}\hat{\sigma})(\mathbf{U}^{-1})^T = (\mathbf{U}^{-1})^T\mathbf{\Lambda} \quad (5.56)$$

と書き換えられる。このことから、

$$\mathbf{D}(\mathbf{U}^{-1}\hat{\sigma})^T = (\mathbf{U}^{-1}\hat{\sigma})^T\mathbf{\Lambda} \quad (5.57)$$

ただし $(\mathbf{U}^{-1}\hat{\sigma})^T = (|v'(\lambda_1)\rangle, |v'(\lambda_2)\rangle, \dots)$ という関係式が得られる。(5.50) 式及び (5.57) 式から、結局

$$v'_m(\lambda) = A_\lambda u_m(\lambda) \quad (5.58)$$

という関係式が成立している事が示された。ここで、 A_λ は λ に依存する定数である。この A_λ の具体的にとる値は、(5.6a,b) 式の biorthogonality condition より、

$$A_\lambda = \frac{1}{\sum_n \sigma_n \{u_n(\lambda)\}^2}$$

として与えられる。このことから、式(5.52) は、

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \langle n+1 \rangle \frac{\pi}{V} \sum_\lambda \delta(\omega - \omega_\lambda) \left[\left\{ \sum_m \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m) v'_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n) u_n(\lambda) \right\} + \left\{ \sum_m \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m) v'_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n) u_n(\lambda) \right\} \right] \quad (5.59)$$

と書き直すことができる。

ここで

$$\mu_\lambda^2 u_m(\lambda) = \sum_n D'_{mn} u_n(\lambda) \quad (5.60a)$$

$$\mu_\lambda^2 v'_m(\lambda) = \sum_n (\sigma_m D'_{nm} \sigma_n) v'_n(\lambda) \quad (5.60b)$$

という2つの固有値方程式を考えよう。ここで μ_λ と D'_{mn} は5.1節で定義された量である。ここで強制振動子法を適用するため、2階の微分方程式にマッピングする。すなわち、

$$\frac{d^2}{dt^2} x_m(t) = - \sum_n D'_{mn} x_n(t) \quad (5.61a)$$

及び

$$\frac{d^2}{dt^2} z_m(t) = - \sum_n (\sigma_m D'_{nm} \sigma_n) z_n(t) \quad (5.61b)$$

ここで $x_m(t)$ と $z_m(t)$ は、

$$x_m(t) \equiv \sum_\lambda P_\lambda(t) u_m(\lambda)$$

$$z_m(t) \equiv \sum_\lambda R_\lambda(t) v'_m(\lambda)$$

として展開される量である。また $P_\lambda(t)$ と $R_\lambda(t)$ は各々 λ モードの振幅である。式(5.61a,b)から、 $P_\lambda(t)$ も $R_\lambda(t)$ も $\sim \exp(-i\mu_\lambda t)$ という時間依存性をもつ事がわかる。ここで、(5.61a,b)式の右辺に $\sigma_m F_m \cos(\Omega t)$ という強制外力項を加える。整理すると、

$$\frac{d^2 P_\lambda(t)}{dt^2} + \mu_\lambda^2 P_\lambda(t) = \left\{ \sum_m F_m v'_m(\lambda) \right\} \cos(\Omega t) \quad (5.62a)$$

$$\frac{d^2 R_\lambda(t)}{dt^2} + \mu_\lambda^2 R_\lambda(t) = \left\{ \sum_m F_m u_m(\lambda) \right\} \cos(\Omega t) \quad (5.62b)$$

となる。次に、 $\tilde{H}(t)$ という量を以下に導入する。

$$\begin{aligned} \tilde{H}(t) &\equiv \frac{1}{2} \sum_m \sigma_m \dot{x}_m(t) \dot{z}_m(t) + \frac{1}{2} \sum_m \sum_n \sigma_m z_m(t) D'_{mn} x_n(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_\lambda \left\{ \dot{P}_\lambda(t) \dot{R}_\lambda(t) + \mu_\lambda^2 P_\lambda(t) R_\lambda(t) \right\} \end{aligned} \quad (5.63)$$

ここで $\xi_\lambda(t) \equiv \dot{P}_\lambda(t) + i\mu_\lambda P_\lambda(t)$ および $\zeta_\lambda(t) \equiv \dot{R}_\lambda(t) + i\mu_\lambda R_\lambda(t)$ と定義すると、式 (5.63) は $\tilde{H}(t) = 1/2 \sum_\lambda \xi_\lambda^*(t) \zeta_\lambda(t)$ と整理できる。(5.12a,b) 式と同様の計算から、 t 時間後の $\xi_\lambda(t)$ と $\zeta_\lambda(t)$ は各々

$$\xi_\lambda(t) \approx \frac{e^{i\mu_\lambda t}}{2} \left\{ \sum_m F_m v'_m(\lambda) \right\} \frac{e^{i(\Omega - \mu_\lambda)t} - 1}{i(\Omega - \mu_\lambda)} \quad (5.64a)$$

$$\zeta_\lambda(t) \approx \frac{e^{i\mu_\lambda t}}{2} \left\{ \sum_m F_m u_m(\lambda) \right\} \frac{e^{i(\Omega - \mu_\lambda)t} - 1}{i(\Omega - \mu_\lambda)} \quad (5.64b)$$

となる。これらを $\tilde{H}(t)$ の定義式 (5.63) に代入すると

$$\tilde{H}(t, \Omega) = \frac{1}{2} \sum_\lambda \left\{ \sum_m F_m v'_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \frac{\sin^2 \{(\mu_\lambda - \Omega)t/2\}}{(\mu_\lambda - \Omega)^2} \quad (5.65)$$

となる。外力時間 T を十分長くとると、 $\tilde{H}(T, \Omega)$ は、

$$\tilde{H}_q(T, \Omega) \equiv \frac{\pi T}{4} \sum_\lambda \delta(\mu_\lambda - \Omega) \left\{ \sum_m F_m v'_m(\lambda) \right\} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \quad (5.66)$$

となる。ここで (5.16) 式を用いた。 $S(\mathbf{q}, \omega)$ を計算するため、外力振幅 F_m を $F_m = F_0 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m)$ 及び $F_m = F_0 \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m)$ とおく。その結果 $\tilde{H}(T, \Omega)$ は、

$$\tilde{H}_q^c(T, \Omega) \equiv \frac{\pi T F_0^2}{4} \sum_\lambda \delta(\mu_\lambda - \Omega) \left\{ \sum_m v'_m(\lambda) \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m) \right\} \left\{ \sum_n u_n(\lambda) \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n) \right\} \quad (5.67a)$$

及び

$$\tilde{H}_q^s(T, \Omega) \equiv \frac{\pi T F_0^2}{4} \sum_\lambda \delta(\mu_\lambda - \Omega) \left\{ \sum_m v'_m(\lambda) \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m) \right\} \left\{ \sum_n u_n(\lambda) \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n) \right\} \quad (5.67b)$$

となる。よって式 (5.54)、(5.67a)、(5.67b) より、動的構造因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ は

$$S(\mathbf{q}, \omega) \approx \langle n+1 \rangle \left| \frac{d\mu(\omega)}{d\omega} \right| \frac{4}{TF_0^2} \left\{ \tilde{H}_q^c(T, \mu(\omega)) + \tilde{H}_q^s(T, \mu(\omega)) \right\} \quad (5.68)$$

として得られる事が示された。

実際に $S(\mathbf{q}, \omega)$ を求めるときは、反強磁性スピン波の固有ベクトル $u_m(\lambda)$ ならびに $v_m(\lambda)$ の間の性質を用いて、上記の計算を簡単化する事ができる。すなわち、初期条件 $x_m(t=0) = \dot{x}_m(t=0) = z_m(t=0) = \dot{z}_m(t=0) = 0$ において、 $x_m(t)$ 及び $z_m(t)$ は具体的に

$$x_m(t) = \sum_{\lambda} \left\{ \sum_n F_n v'_n(\lambda) \right\} \frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_{\lambda})T/2\} \sin \{(\Omega - \mu_{\lambda})T/2\}}{\Omega^2 - \mu_{\lambda}^2} u_m(\lambda) \quad (5.69a)$$

及び

$$z_m(t) = \sum_{\lambda} \left\{ \sum_n F_n u_n(\lambda) \right\} \frac{2 \sin \{(\Omega + \mu_{\lambda})T/2\} \sin \{(\Omega - \mu_{\lambda})T/2\}}{\Omega^2 - \mu_{\lambda}^2} v'_m(\lambda) \quad (5.69b)$$

となる。ここで(5.58)式に述べたとおり、 $v'_m(\lambda) = A_{\lambda} u_m(\lambda)$ 及び $v_m(\lambda) = A_{\lambda} u'_m(\lambda)$ という性質があるので、 $x_m(t) = z_m(t)$ である事がわかる。従って、(5.68)式を評価する上で式(5.69a)と(5.69b)の片一方のみを計算すれば良い。このことはCPU時間の大幅な節約になる。外力時間 T の選ぶ基準については5.1節で述べた固有値密度分布の計算のそれと全く同じである。上記の方法は、古典ハイゼンベルグ反強磁性体上のスピン波励起だけでなく、格子振動問題での $S_{vib}(\mathbf{q}, \omega)$ の数値計算にも応用できる。すなわち、 $\mathbf{u}_m(\lambda) = \{u_m^x(\lambda), u_m^y(\lambda), u_m^z(\lambda)\}$ が格子振動の固有ベクトルであるとき、

$$S_{vib}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\langle n+1 \rangle}{\omega} \sum_{\lambda} \delta(\omega - \omega_{\lambda}) \left| \sum_m \{ \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_m(\lambda) \} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} \right|^2 \quad (5.70)$$

を求めればよい [90, 108, 127]。(5.60a,b)式以下と同様の手続きにより、大規模な系の $S_{vib}(\mathbf{q}, \omega)$ の振動数依存性、波数依存性を容易に求める事が可能である。

第6章 結論

本論文は、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的性質について調べたものである。本章では、論文中で得られた一連の結論について総括する。

本論文では、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体におけるスピンの配置を、パーコレーション・ネットワークとして捉え、フラクタル構造におけるスピン波励起の性質について数値的に調べた。反強磁性体のスピン波励起を記述するダイナミカル・マトリックスは非対称行列であり、固有ベクトル間の直交性が存在していない等の数学的困難がある為今まで十分な研究がなされていなかった。本論文ではこの点に関し、従来大規模対称（エルミート）行列の固有値解析に用いられていた強制振動子法を実数固有値をもつ非対称行列の固有値問題に拡張した。このことにより、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体のスピン波状態密度に関する大規模数値計算を行う事が可能となった。その結果、系全体が自己相似性をもつ臨界濃度 p_c においては、スピン波励起が異常分散 ($\omega \sim q^{z_{AF}}$) をもつ反強磁性フラクトンが存在して、かつその動的性質を特徴づけるフラクトン次元 \tilde{d}_{AF} は系の空間次元（ユークリッド次元）によらずほぼ 1 に等しい値をとる事が分かった。この結果は、従来のスケーリング理論による予想 [65] と一致している。また、今までによく調べられている振動フラクトンにおいては、フラクトン次元の値は系の空間次元によらずほぼ 4/3 に等しい値をとる事が知られているので、反強磁性フラクトンは振動フラクトンとは異なるユニバーサリティー・クラスに属する事が明らかになった。また臨界濃度よりも高い濃度をもつ系において同様にスピン波状態密度を調べた結果、マグノン-フラクトン・クロスオーバーにおいて状態密度には hump が存在しない事が分かった。

また、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体における動的構造因子の振る舞いについて調べた。フラク톤は唯一つの特徴的長さ $\Lambda(\omega)$ をもつ (single-length-scaling) という仮説から、動的構造因子 $S(q, \omega)$ も $\Lambda(\omega)$ を用いてスケールされるであろうと予想されていた。本論文では、臨界濃度 p_c における動的構造因子を厳密対角化の方法によって数値的に調べ、その漸近的な ω 依存性ならびに q 依存性を初めて明らかにした。その結果、反強磁性フラクトンに関する動的構造因子は、単一の特徴的長さ $\Lambda(\omega)$ でスケールされる事が実証された。

本論文では強制振動子法というアルゴリズムを拡張する事によって、動的構造因子 $S(q, \omega)$ の大規模数値計算法を新たに開発した。このことにより中性子非弾性散乱による実験的研究が盛んに行われている、3次元系での動的構造因子を詳細に調べる事が可能となった。また実際にこの方法を用いて、 $p > p_c$ での動的構造因子の振る舞いを明らかにした。従来の研究によると、マグノン-フラクトン・クロスオーバー近傍において動的構造因子の ω 依存性には、マグノンとフラクトンという2種類の励起状態が存在する事に基づくダブルピーク構造が存在すると考えられていた。それに対して、2次元系及び3次元系において臨界濃度近傍 ($p > p_c$) における動的構造因子の ω 依存性を数値的に調べた。その結果小さな波数に関しては、高エネルギー側に tail をもつ非対称な鋭いピークが観測された。このピークはマグノンの存在を反映したものである。波数を大きくするとピーク位置は高エネルギー側に移動すると同時にピーク幅が急激にブロードになるという結果が得られた。そして $\omega > \omega_c$ (ω_c はクロスオーバー・エネルギー) においては動的構造因子のとり値には q 依存性が殆ど見られなかった。このことは、空間的に極めて強く局在した励起状態であるフラクトンの存在を反映している。また従来の予想とは異なり、マグノン-フラクトン・クロスオーバー近傍において動的構造因子の ω 依存性にはピークが一つしかない事が明らかになった。

また、Uemura-Birgeneau [33,34] による $\text{Mn}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{F}_2$ に関する中性子非弾性散乱実験で報告されていた、動的構造因子に関するダブルピークの物理的起源について考察した。具体的には3次元立方格子上で、臨界濃度から離れた高い濃度 ($p = 0.75$) という彼らの実験と比較的近い状況において、希釈ハイゼンベルグ反強磁性体の動的構造因子を調べた。その結果波数の小さな領域では1本の鋭いピーク、波数の大きな領域では6本のピークが観測された。またその中間の波数である $q \approx 0.25q_{zb}$ 近傍においては、動的構造因子の ω 依存性に明瞭な2つのピークが見いだされた。これらの結果は、Takahashi-Ikeda [63] による $\text{RbMn}_{0.74}\text{Mg}_{0.26}\text{F}_3$ に関する実験結果と非常によく一致した。ここで観測されたダブルピークにおいて、低エネルギー側のピークは linear dispersion に従っているので、マグノンによるものであると考えられる。また高エネルギー側のピークは、波数の大きな領域で顕著にあらわれるイジングクラスター励起とよばれる励起状態の寄与によるものと解釈される。

希釈ハイゼンベルグ反強磁性体におけるイジングクラスター励起について調べるため、ブリルアン・ゾーン境界における動的構造因子の濃度依存性を明らかにした。その結果、系の配位数を反映した6本のピークにおいて、系の濃度を下げると共に低エネルギー側のピーク強度が相対的に増大するという結果が得られた。このことは希釈の効果により系の平均的な配位数が減少する事を反映していると考えられる事ができ、中性子散乱実験による報告 [63] と一致している。本論文ではさらに希釈ハイゼンベルグ磁性体と希釈イジング磁性体におけるイジングクラスター励起の相違点に関して考察した。すなわち、希釈ハイゼンベルグ磁性体におけるイジングクラスター励起は各サイトの配位数を反映したものであるが単一スピンの励起状態ではなく、従来よく調べられている希釈イジング磁性体のそれとは異なる事が分かった。

最後に今後の課題について述べる。本論文で考察したパーコレーション反強磁性

体はフラストレーションの存在しない系であるが、フラストレーションの効果 [128] も興味深い。最近 Kagomé 格子反強磁性体の研究が盛んに行われている。Kagomé 格子反強磁性体は、graphite に吸着した³He や [129]、 $\text{SrCr}_{8-x}\text{Ga}_{4+x}\text{O}_{19}$ [130] などのモデルである。この系には基底状態に連続縮退があるため、全ブリルアンゾーンにおいて励起エネルギーがゼロであるモードが存在し [131]、基底状態の秩序状態、比熱、帯磁率等が注目されている [119,132]。このような系を希釈する事により、熱力学的性質および動的性質がいかなる振る舞いを示すかという問題は非常に興味深い [133,134]。また量子スピン系 ($S = 1/2$) における希釈の効果も研究されている [135]。すなわち基底状態において、反強磁性長距離秩序を喪失する磁性濃度とパーコレーション臨界濃度 p_c とは一致するか否かという問題である。この点も今後の問題として残されている。

本論文ではスーパー・コンピューターに適した大規模シミュレーション手法の開発を行った。近年ベクトル・パイプライン方式のコンピューターと並んで、並列型計算機 (parallel computer) という新しいアーキテクチャーをもつ計算機が出現している。それに伴い “Parallel computing” [136,137] に適したアルゴリズムの開発に対する需要がますます大きくなると考えられ、今後の発展が望まれる。

謝辞

本研究を遂行するに当たり、終始熱心なる御指導、御鞭撻を賜りました中山恒義教授に心より感謝の意を表します。また、日頃本研究に関し有益なる議論、助言をいただきました矢久保考介助教授に深謝致します。また本論文作成にあたり御指導を頂きました、本学工学部極限物理工学講座の山谷和彦教授、同 工業数学講座の田村信一郎教授、同 工業数理科学講座の徳田直樹教授に感謝いたします。高エネルギー物理学研究所の池田宏信教授には、本研究に対し実験的な側面から有意義な議論をしていただきましたことに感謝致します。最後に極限物理工学講座の丹田聡助教授、ならびに石橋輝雄技官、事務の木村久美子様をはじめとした応用数理物理学講座の皆様には多方面にわたりお世話になりました。ここに謝意を表します。

参考文献

- [1] J. M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge Univ. , London, 1979).
- [2] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd Edition (Taylor & Francis, London, 1992).
- [3] A. Bunde and S. Havlin, in *Fractals and disordered systems*, eds. A. Bunde and S. Havlin (Springer, Berlin, 1991).
- [4] 小田垣 孝, パーコレーションの科学 (裳華房, 1993) .
- [5] T. Nakayama, K. Yakubo and R. Orbach, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 381 (1994).
- [6] B. B. Mandelbrot, *Fractals: Form, Chance, and Dimension*. (W. H. Freeman, New York, 1977).
- [7] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (W. H. Freeman, New York, 1982).
- [8] 高安秀樹, フラクタル (朝倉書店, 1986) .
- [9] J. Feder, *Fractals* (Plenum, New York, 1988).
- [10] R. A. Cowley and W. J. L. Buyers, *Rev. Mod. Phys.* **44** 407 (1972).
- [11] R. B. Stinchcombe, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 7 , ed. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, New York, 1983).
- [12] R. J. Birgeneau, R. A. Cowley, G. Shirane and H. Yoshizawa, *J. Stat. Phys.* **34** 817 (1984).

- [13] R. B. Stinchcombe, Proc. R. Soc. Lond. A**423**, 17 (1989).
- [14] G. Aeppli, H. Guggenheim and Y. J. Uemura, Phys. Rev. Lett. **52**, 942 (1984).
- [15] S. Jain, J. Phys. A**19**, L57 (1986).
- [16] S. Jain, J. Phys. A**19**, L667 (1986).
- [17] H. Ikeda and K. Ohoyama, Phys. Rev. B**45**, 7484 (1992), and references therein.
- [18] S. Alexander and R. Orbach, J. Phys.(Paris) Lett. **43**, L625 (1982).
- [19] Y. Gefen, A. Aharony and S. Alexander, Phys. Rev. Lett. **50**, 77 (1983).
- [20] Kin-Wah Yu and R. Orbach, Phys. Rev. B**30**, 2760 (1984).
- [21] R. Orbach and Kin-Wah Yu, J. Appl. Phys. **61**, 3689 (1987).
- [22] G. Polatsek, O. Entin-Wohlman and R. Orbach, J. Phys.(Paris) C**8**, 1191 (1988).
- [23] G. Polatsek, O. Entin-Wohlman and R. Orbach, Phys. Rev. B**39**, 9353 (1989).
- [24] J. A. Ashraff and B. W. Southern, J. Phys. A**21**, 2431 (1988).
- [25] I. R. Pimentel and R. B. Stinchcombe, J. Phys. A**22**, 3959 (1989).
- [26] *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics III*, eds. D. P. Landau, K. K. Mon and H. -B. Schütter, (Springer, New York, 1990).
- [27] *Computational Approaches in Comdensed Matter Physics*, eds. S. Miyashita, M. Imada and H. Takayama, (Springer, New York, 1992).

- [28] 日本物理学会編, 計算機物理学 (培風館, 1991) .
- [29] 今田 正俊, 固体物理 **24**, 155 (1989).
- [30] K. Binder and A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986).
- [31] K. Kaneko, in Ref. [27].
- [32] B. Kramer, in *Anderson Localization*, eds. T. Ando and H. Fukuyama, (Springer, New York, 1987).
- [33] Y. J. Uemura and R. J. Birgeneau, Phys. Rev. Lett. **57**, 1947 (1986).
- [34] Y. J. Uemura and R. J. Birgeneau, Phys. Rev. **B36**, 7024 (1987).
- [35] M. L. Williams and H. J. Maris, Phys. Rev. **B31**, 4508 (1985).
- [36] K. Yakubo, T. Nakayama and H. J. Maris, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 3249 (1991).
- [37] T. Nakayama, M. Takano and K. Yakubo, Phys. Rev. **B47**, 9249 (1993).
- [38] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, Proc. Cambridge Philos. Soc. **53**, 629 (1957).
- [39] Ora Entin-Wohlman, S. Alexander, R. Orbach, and Kin-Wah Yu, Phys. Rev. **B29**, 4588 (1984).
- [40] B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, (Springer, Berlin, 1984).
- [41] P. Sheng, Philos. Mag. **B65**, 357 (1992).
- [42] H. Kesten, Commun. Math. Phys. **74**, 41 (1980).

- [43] J. C. Wierman, *Adv. Appl. Prob.* **13**, 298 (1981).
- [44] J. W. Essam, *Rep. Prog. Phys.* **43**, 833 (1980).
- [45] J. Adler, Y. Meir, A. Aharony and A. B. Harris, *Phys. Rev.* **B41**, 9183 (1990),
and see references therein.
- [46] M. P. M. den Nijs, *J. Phys.* **A12**, 1857 (1979).
- [47] B. Nienhuis, *J. Phys.* **A15**, 199 (1982).
- [48] C. J. Lobb and D. J. Frank, *Phys. Rev.* **B30**, 4090 (1984).
- [49] R. Rammal and G. Toulouse, *J. Phys. (Paris) Lett.* **44**, L13 (1983).
- [50] S. J. Lewis and M. C. M. O'Brien, *J. Phys.* **C18**, 4487 (1985).
- [51] S. N. Evangelou, *Phys. Rev.* **B33**, 3602 (1986).
- [52] S. N. Evangelou, N. I. Papanicolaou and E. N. Economou, *Phys. Rev.* **B43**,
11171 (1991).
- [53] R. Argyrakis, S. N. Evangelou and K. Magoutis, *Z. Phys.* **B87**, 257 (1992).
- [54] T. Nakayama, *Physica* **A191**, 386 (1992).
- [55] R. Rammal, J. C. Angles d'Auriac and A. Benoit, *Phys. Rev.* **B30**, 4087
(1984).
- [56] A. B. Harris, S. Kim and T. C. Lubensky, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 743 (1984).
- [57] O. W. Dietrich, G. Meyer, R. A. Cowley and G. Shirane, *Phys. Rev. Lett.* **35**,
1735 (1975).

- [58] E. C. Svensson, W. J. L. Buyers, T. M. Holden and D. A. Jones, AIP Conference Proceedings **29**, 248 (1975).
- [59] G. J. Coombs, R. A. Cowley, W. J. L. Buyers, E. C. Svensson, T. M. Holden and D. A. Jones, J. Phys. C **9**, 2167 (1976).
- [60] M. Itoh and H. Yasuoka, J. Mag. Mag. Mater. **18**, 4487 (1985).
- [61] C. G. Windsor and R. W. H. Stevenson, Proc. Phys. Soc. **87**, 501 (1966).
- [62] M. Takahashi, S. Ikeda and H. Ikeda, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 387 (1991).
- [63] M. Takahashi and H. Ikeda, Phys. Rev. B **47**, 9132 (1993).
- [64] A. Christou and R. B. Stinchcombe, J. Phys. C **19**, 5895 (1986).
- [65] A. Christou and R. B. Stinchcombe, J. Phys. C **19**, 5917 (1986).
- [66] R. J. Birgeneau, R. A. Cowley, G. Shirane, J. A. Tarvin and H. J. Guggenheim, Phys. Rev. B **21**, 317 (1980).
- [67] A. Brooks Harris and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **16**, 542 (1977).
- [68] T. Ziman, in *Scaling Phenomena in Disordered Systems*, eds. R. Pynn and A. Skjeltorp, 361 (Plenum, New York, 1985).
- [69] H. Ikeda, K. Iwasa and K. H. Andersen, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 3832 (1993).
- [70] C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **54**, 2030 (1985).
- [71] A. Christou and R. Stinchcombe, Phys. Rev. B **38**, 11755 (1988).
- [72] S. Fishman and A. Aharony, J. Phys. C **12**, 505 (1984).

- [73] M. Lederman, J. V. Selinger, R. Bruinsma, J. Hammann, and R. Orbach, Phys. Rev. Lett. **68**, 2086 (1992).
- [74] M. Lederman, J. V. Selinger, R. Bruinsma, R. Orbach and J. Hammann, Phys. Rev. **B48**, 3810 (1993).
- [75] U. Nowak and K. D. Usadel, Phys. Rev. **B44**, 7426 (1991).
- [76] U. Nowak and K. D. Usadel, Phys. Rev. **B46**, 8329 (1992).
- [77] U. Nowak and K. D. Usadel, Phys. Rev. **B39**, 2516 (1989).
- [78] U. Nowak and K. D. Usadel, Phys. Rev. **B43**, 851 (1991).
- [79] P. Bak, C. Tang and K. Wiesenfeld, Phys. Rev. Lett. **59**, 381 (1987).
- [80] U. Nowak and K. D. Usadel, Physica **B165 & 166**, 211 (1990).
- [81] U. Nowak, Fractals, **1**, 992 (1993).
- [82] E. F. Shender, Sov. Phys. JETP**48**, 175 (1978).
- [83] H. E. Stanley, *Introduction to phase transition and critical phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1971).
- [84] 小林秋男 他訳, ランダウリフシツ 統計物理学 第3版 (岩波書店, 1980).
- [85] W. Brenig, P. Wölfle and G. Dohler, Z. Phys. **246**, 1 (1971).
- [86] D. Kumar and A. Brooks Harris, Phys. Rev. **B32**, 3251 (1985).
- [87] G. -J. Hu and D. L. Huber, Phys. Rev. **B33**, 3599 (1986).

- [88] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* 6th edition, (John Wiley & Sons, New York, 1986).
- [89] K. Yakubo, T. Terao and T. Nakayama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **62**, 2196 (1993).
- [90] T. Terao, K. Yakubo and T. Nakayama, *Phys. Rev.* **E50**, 566 (1994).
- [91] K. Yakubo, T. Terao and T. Nakayama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 3431 (1994).
- [92] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [93] D. Kumar, *Phys. Rev.* **B30**, 2961 (1984).
- [94] R. Alben and M. F. Thorpe, *J. Phys.* **C8**, L275 (1975).
- [95] M. F. Thorpe and R. Alben, *J. Phys.* **C9**, 2555 (1976).
- [96] D. J. Thouless, *Phys. Rep.* **13**, 93 (1974).
- [97] T. Terao, K. Yakubo and T. Nakayama, *Phys. Rev.* **B49**, 12281 (1994).
- [98] T. Nagatani, *J. Phys.* **A18**, L1149 (1985).
- [99] R. B. Stinchcombe and A. C. Maggs, *J. Phys.* **A19**, 1949 (1986).
- [100] C. K. Harris and R. B. Stinchcombe, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1399 (1983).
- [101] W. Marshall and S. Lovesey, *Theory of Thermal Neutron Scattering*, (Oxford UP, London, 1971).
- [102] W. J. L. Buyers, D. E. Pepper and R. J. Elliott, *J. Phys.* **C5**, 2611 (1972).
- [103] W. J. L. Buyers, D. E. Pepper and R. J. Elliott, *J. Phys.* **C6**, 1933 (1972).
- [104] W. K. Holcomb and A. B. Harris, *AIP Conference Proceedings* **24**, 248 (1974).

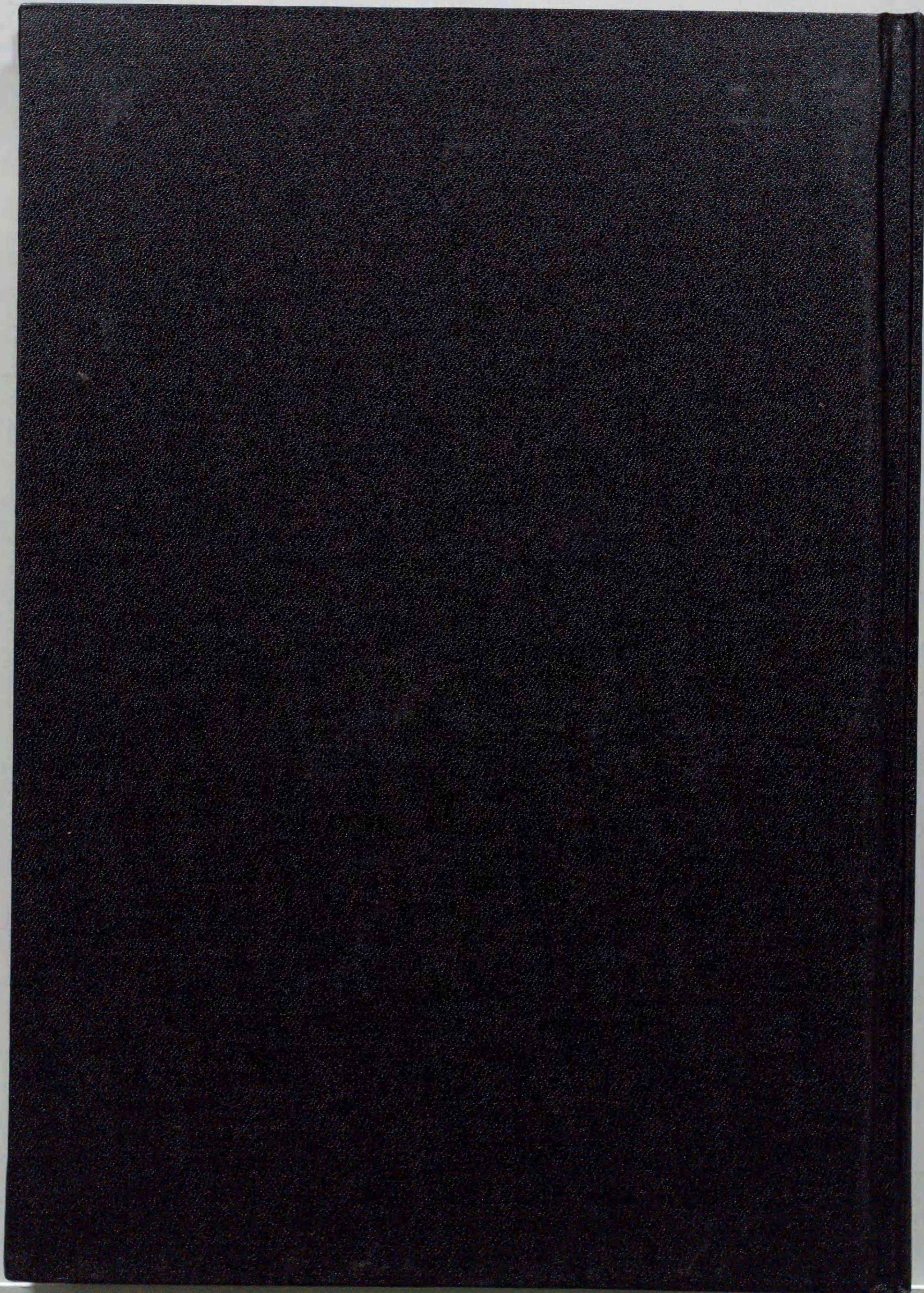
- [105] R. A. Cowley, G. Shirane, R. J. Birgeneau, and H. J. Guggenheim, *Phys. Rev.* **B15**, 4292 (1977).
- [106] T. Odagaki and M. Lax, *Phys. Rev.* **B24**, 5274 (1981).
- [107] I. Webman, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1496 (1981).
- [108] S. Alexander, E. Courtens and R. Vacher, *Physica A* **195**, 286 (1993).
- [109] S. Kirkpatrick and A. B. Harris, *Phys. Rev.* **B12**, 4980 (1975).
- [110] T. Terao and T. Nakayama, to be submitted.
- [111] S. Kirkpatrick, *AIP Conference Proceedings* **29**, 141 (1975).
- [112] H. Ikeda and G. Shirane, *J. Phys. Soc. Jpn.* **46**, 30 (1979).
- [113] S. Kirkpatrick and T. P. Eggarter, *Phys. Rev.* **B6**, 3598 (1972).
- [114] K. Chen and D. P. Landau, *J. Appl. Phys.* **73**, 5645 (1993).
- [115] See, for example, *Large Scale Eigenvalue Problems*, ed. J. Cullum and R. A. Willoughby (North-Holland, Amsterdam, 1986).
- [116] J. H. Wilkinson and C. Reinsch, *Linear Algebra*, (Springer Verlag, Berlin, 1971).
- [117] F. Chatelin, *Valeurs Propres de Matrices* (Masson, Paris, 1988).
- [118] J. K. Cullum and R. K. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Problems*, (Birkhäuser, Boston, 1985).
- [119] K. Fukamachi and H. Nishimori, *Phys. Rev.* **B49**, 651 (1994).

- [120] H. Tanaka and T. Fujiwara, *Phys. Rev.* **B49**, 11440 (1994) .
- [121] K. Hukushima, K. Nemoto and H. Takayama (in preparation).
- [122] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, (University of Texas Press, Austin, 1980).
- [123] Y. Okamoto and H. J. Maris, *Comput. Phys. Commun.* **76**, 191 (1993).
- [124] F. Keffer, H. Kaplan and Y. Yafet, *Am. J. Phys.* **21**, 250 (1953).
- [125] D. Beeman and R. Alben, *Adv. in Phys.* **26**, 339 (1977).
- [126] P. de Vries and H. De Raedt, *Phys. Rev.* **B47**, 7929 (1993).
- [127] E. Stoll, M. Kolb and E. Courtens, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2472 (1992).
- [128] R. B. Stinchcombe, *Physica D***38**, 345 (1989).
- [129] V. Elser, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2405 (1989).
- [130] A. P. Ramirez, G. P. Espinosa and A. S. Cooper, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2070 (1990).
- [131] J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth and E. F. Shender, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 855 (1992).
- [132] P. W. Leung and V. Elser, *Phys. Rev.* **B47**, 5459 (1993).
- [133] E. F. Shender, V. B. Cherepanov, P. C. W. Holdsworth and A. J. Berlinsky, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3812 (1993).
- [134] D. L. Huber and W. Y. Ching, *Phys. Rev.* **B47**, 3220 (1993).

[135] J. Behre and S. Miyashita, *J. Phys.* **A25**, 4745 (1992).

[136] E. Loh, in Ref. [27].

[137] G. H. Golub and C. F. van Loan, *Matrix Computation*, (Johns Hopkins, Baltimore and London, 1989).



Inches 1 2 3 4 5 6 7 8
cm 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19

Kodak Color Control Patches

© Kodak, 2007 TM: Kodak



Kodak Gray Scale



© Kodak, 2007 TM: Kodak

A 1 2 3 4 5 6 M 8 9 10 11 12 13 14 15 B 17 18 19

