
修士論文 (1984年度)

三角格子反強磁性基底状態アンサンブルと構造解析

筑波大学・物理工学 中島 幸久

要 旨

三角格子反強磁性 Ising 模型に運動法則を導入し、縮重した基底状態の集合(アンサンブル)の性質を詳細に考察した。目標とするものは、系の位相空間の構造を推定し、多数派スピと少数派スピンの比率(濃度)だけの関数のなんらかの異常性をガラス転移と関連づけることである。

目 次

第1章 序 論

第2章 アンサンブルの静的性質と運動法則

2-1 節 静的アンサンブルの性質

2-2 節 運動法則の導入

2-3 節 スピン対相関

第3章 乱れの分析

3-1 節 乱れの定義と分類

3-2 節 等高グラフ

3-3 節 点欠陥と梯子状境界

3-4 節 キンクの伝播性の推定

3-5 節 点欠陥とループ状境界

3-6 節 Monte Carlo 法による動的性質

第4章 長距離構造の特性

4-1 節 色のくり込み

4-2 節 局所濃度

NAKAJIMA, Yukihsa

中島幸久

第5章 局所構造の特性

5-1節 非隣接スピン対相関のある構造

5-2節 尾根線と谷線

第6章 考察

謝 辞

参考文献

第1章 序 論

三角格子反強磁性 Ising 模型は、最近実験的にも理論的にも大変興味を持たれ、多くの研究がなされている。この系の特徴は、最隣接格子点を作る正三角形ですべての隣接対が反平行なスピン配位が存在しないことであり、完全にフラストレートした系である。そのため基底状態が巨視的に縮重し、独特の振舞いが見られる。

Wannier¹⁾ は、この模型の基底状態の縮重度を厳密に求めている。しかし、縮重した基底状態の集合(アンサンブル)については、ほとんど調べられていないようである。

我々は、この系に運動法則を導入し、動的性質を通してアンサンブルの秩序と乱れに関する考察を行い、「ガラス転移」と関連づけることを試みた。

乱れた系の配位の特徴を理解し、位相空間の構造を推定することは、いまの模型より複雑な系では、不可能に近い。そのため、本模型について、基底状態アンサンブルの特徴の詳細な検討を行なった。

本論文の構成は以下の通りである。

第2章で静的アンサンブルの特徴を調べ、運動法則を導入する。

第3章で乱れの定義と分類を行い、それらの諸特性を調べる。系の静的性質及び動的性質を理解するためにグラフによる方法を考える。最後に動きを Monte Carlo 法で調べる。

第4章で系の長距離的配位の特徴を抽出することを試みる。

第5章で非隣接スピン対相関のある局所構造をグラフのトポロジカルなつながりに帰着させることを試みる。

第6章で全体の考察をする。

第2章 アンサンブルの静的性質と運動法則

最隣接格子点を作る正三角形で、三点のすべてが同じ状態になることが禁じられている三角格子反強磁性 Ising 模型の基底状態に限ったアンサンブルの考察を進める。

まず菊池近似を用いてアンサンブルの特徴を調べる。次に運動法則を導入して動きを定義する。

2-1節 静的アンサンブルの性質

(1) 菊池近似²⁾

基本思想は、「局所で起こりうることを尽くし、矛盾なく全系をおおうという条件で自由エネルギーが最小になるように、系統的にエントロピーの表式を与え、局所で起こることの相対頻度を決定する」ことである。

格子点を与えられているとすると、いくつかの格子点からなる基本図形を定める。この決め方が近似の精度と関係があり、大きな基本図形をとるほど高次の近似である。そして、高次の近似と低次の近似のつじつまが、系統的に合っている。

N 個のスピンのから成る一つの体系と、類似な L 個の体系を考え、アンサンブルとする。(図2-1)各格子点は N_+ , N_- 個のスピンの, Q_{++} , Q_{+-} , Q_{-+} , Q_{--} 個のスピンの対をもつものとする。 L 個の体系のおおのにおいて、 k 番目の格子点で+あるいは-スピンの確率が $x_1 \equiv N_+/N$, $x_2 \equiv N_-/N$ であり、また k' 番目の対で、++, +-, -+, --である確率が、 $y_1 \equiv Q_{++}/Q$, $y_2 \equiv Q_{+-}/Q$, $y_3 \equiv Q_{-+}/Q$ である場合に、このアンサンブルはつじつまが合うことになる。

そこで、局所で起こりうるものが、アンサンブル全体でつじつまが合うように可能な場合の数を求めることで、エントロピーの表式が与えられるのである。

以下では、図2-2の格子点Aにスピンを置く場合の数を求め、エントロピーを計算する。

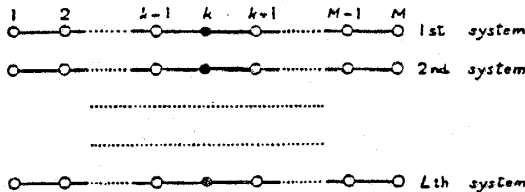


図2-1 一次元格子のアンサンブル

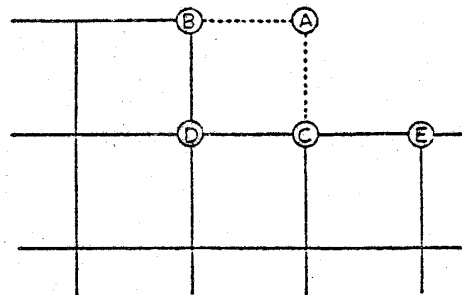


図2-2 正方格子のA点にスピンを置く場合

中島幸久

この計算方法は、次の三段階から成っている。

(i) まず、B点に注目しつつA点にスピンを置き、CAには注意せずに、ただ対BAがつじつまを合わせる場合の数は、

$$g = \frac{(x_1 L)!}{(y_1 L)! (y_2 L)!} \cdot \frac{(x_2 L)!}{(y_2 L)! (y_3 L)!} = \frac{\prod_{i=1}^3 (x_i L)!}{\prod_{i=1}^3 (y_i L)!^{\beta_i}} \quad (2-1)$$

(ただし $\beta_1 = \beta_3 = 1$ $\beta_2 = 2$)

である。

(ii) 次に、CAでもつじつまが合うための補正項を求める。まず、Cに独立にAにスピンを置く方法は、

$$g_0 = \frac{L!}{(x_1 L)! (x_2 L)!} = \frac{L!}{\prod_{i=1}^2 (x_i L)!}$$

であり、C-Aかつじつまが合うための方法は、

$$g_1 = \frac{\prod_{i=1}^2 (x_i L)!}{\prod_{i=1}^3 (y_i L)!^{\beta_i}}$$

である。したがって、Cに独立にA上にスピンを置くとき、結合C-Aでもつじつまが合う確率 Γ は、

$$\Gamma = \frac{g_1}{g_0} = \frac{\left\{ \prod_{i=1}^2 (x_i L)! \right\}^2}{\prod_{i=1}^3 (y_i L)!^{\beta_i} L!} \quad (2-2)$$

である。

(iii) (2-1), (2-2) の g と Γ をかけて、格子点Aにスピンを置き、対BAも対CAも共につじつまが合う場合の数 G_L を求める。すなわち、

$$G_L = g\Gamma = \frac{\left\{ \prod_{i=1}^2 (x_i L)! \right\}^3}{\left\{ \prod_{i=1}^3 (y_i L)!^{\beta_i} \right\}^2 L!} \quad (2-3)$$

である。

M 個の格子点からなる (L 個の) 体系では、

$$G_L' = G_L^M$$

であり、着目する一つの体系では、

$$\tilde{G} = G_L'^{1/L} = G_L^{M/L}$$

の場合の数となる。よって、一つの体系でのエントロピー S は、

$$S = k \ln \tilde{G} = k \left(\frac{M}{L} \right) \ln G_L \quad (2-4)$$

となる。

(2) Hijmans と de Boer による方法³⁾

任意の基本図形に対するエントロピーの表式は、Hijmans と de Boer による方法がある。

(n) 図形を基本図形に定め、その副図形を、(a), …, (l), (m) とすると、エントロピーは、 $y_n^{(n)}$ N 個の (n) 図形アンサンブル、 $y_n^{(m)}$ N 個の (m) 図形アンサンブル、 $y_n^{(l)}$ N 個の (l) 図形アンサンブル、…、 $y_n^{(a)}$ N 個の (a) 図形アンサンブルのそれぞれのエントロピーの代数和で与えられる。すなわち、

$$S_n = -Nk \sum_{m=a}^n y_n^{(m)} \sum_i \lambda_i^{(m)} p_i^{(m)} \ln p_i^{(m)} \quad (2-5)$$

である。ただし、 $p_i^{(m)}$ は、(m) 図形の状態 i である確率であり $\lambda_i^{(m)}$ は、その図形の実現しうる場合の数である。また $y_n^{(m)}$ は係数で、以下の方法で決定される。

n 個の要素から成る図形集合から二つの図形 i と j をとる。図形 i の中に図形 j が a_{ij} 個含まれているとする。例えば、正方形には点も対も四つ含まれているとみなし、3 を正方形、2 を対、1 を点とすると、 $a_{13} = 4$ 、 $a_{23} = 4$ 、 $a_{33} = 1$ 、 $a_{12} = 2$ 、 $a_{22} = a_{11} = 1$ となる。

a_{ij} を (i, j) 要素にもつ $n \times n$ 正方行列を A とする。 L 個の格子点からなる格子点上に図形 i を配置する方法が、 ξ_i L 個あるとすると、 ξ_i を第 i 要素とする $n \times 1$ 行列を X とする。このとき、 $n \times 1$ 行列 Y を

$$Y = A^{-1} X \quad (2-6)$$

で定義する。 Y の第 m 要素が、求める $y_n^{(m)}$ である。

(3) 二次元三角格子反強磁性基底状態モデルのエントロピー

Hijmans と de Boer の方法を用いて、二次元三角格子反強磁性 Ising 基底状態モデルのエントロピーを求める。

中島幸久

七点からなる最小正六角形を基本図形とする。副図形は、点、対、最小正三角形、最小菱形、最小正六角形であり、それぞれの図形に記号 $i=1, 2, 3, 4, 5$ をつける。

以下の式は、(2-6)式の行列 A と、行列 X を示したものである。すなわち、

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 7 \\ 0 & 1 & 3 & 5 & 12 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

であるから、

$$Y = A^{-1} X = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2-7)$$

となる。したがって、 $y_5^{(1)} = y_5^{(2)} = 0$ 、 $y_5^{(3)} = 2$ 、 $y_5^{(4)} = -3$ 、 $y_5^{(5)} = 1$ であり、エントロピー S_5 は、(2-5)により、

$$S_5 = -Nk \left[2 \sum_i \lambda_i^{(3)} p_i^{(3)} \ln p_i^{(3)} - 3 \sum_i \lambda_i^{(4)} p_i^{(4)} \ln p_i^{(4)} + \sum_i \lambda_i^{(5)} p_i^{(5)} \ln p_i^{(5)} \right] \quad (2-8)$$

となる。以下では便宜上、 $p_i^{(1)} \equiv x_i$ 、 $p_i^{(2)} \equiv y_i$ 、 $p_i^{(3)} \equiv v_i$ 、 $p_i^{(4)} \equiv z_i$ 、 $p_i^{(5)} \equiv w_i$ とおく。

二次元三角格子反強磁性基底状態の副図形(点、対、最小正三角形、最小菱形、最小正六角形)のスピンの配位を図2-3に示す。

以下では、独立変数を決定し、エントロピーを計算する手法について述べる。

図2-3より、確率変数の間には以下の関係が成立している。

$$x_1 + x_2 = 1 \quad (\text{規格化条件}) \quad (2-9)$$

$$x_1 = y_1 + y_2 \quad (2-10)$$

$$x_2 = y_2 + y_3 \quad (2-11)$$

$$y_1 = v_2 \quad (2-12)$$

$$y_2 = v_1 + v_2 \quad (2-13)$$

$$y_3 = v_1 \quad (2-14)$$

$$3v_1 = 2z_1 + z_3 + 2z_4 \quad (2-15)$$

	$R_i^{(a)}$	$\lambda_i^{(a)}$
X	z_1	1
0	z_2	1

	$R_i^{(b)}$	$\lambda_i^{(b)}$
X X	y_1	1
X 0	y_2	2
0 0	y_3	1

	$R_i^{(c)}$	$\lambda_i^{(c)}$
X 0 0	u_1	3
0 X X	u_2	3

	$R_i^{(d)}$	$\lambda_i^{(d)}$
0 X 0 0	z_1	2
0 X X 0	z_2	1
X 0 0 X	z_3	1
X X 0 0	z_4	4
X 0 X X	z_5	2

	$R_i^{(e)}$	$\lambda_i^{(e)}$		$R_i^{(e)}$	$\lambda_i^{(e)}$	
0 0 0 X 0 0 0	w_1	1	X X X 0 X X X	w_6	1	isolated 孤
0 0 0 X X 0 0	w_2	6	X X X 0 0 X X	w_7	6	terminal 端
0 0 X X X 0 0	w_3	3	X X 0 0 0 X X	w_8	3	straight 直
0 X X X 0 0 0	w_4	6	X 0 0 0 X X X	w_9	6	angular 折
0 X X X 0 0 X	w_5	2	X 0 0 0 X X 0	w_{10}	2	branching 岐

図 2-3 基本図形を最小正六角形とした副図形のスピンの配位
 (A)は点, (B)は対, (C)は最小正三角形, (D)は最小菱形,
 (E)は最小正六角形, Xは上向きスピン, Oは下向きスピン,
 (E)のスピンの配位を基本要素と呼ぶ。

中島幸久

$$3v_2 = z_2 + 2z_4 + 2z_5 \quad (2-16)$$

$$2z_1 = w_1 + 3w_2 + w_4 + w_9 + w_{10} \quad (2-17)$$

$$z_2 = w_2 + w_3 + 2w_4 + w_5 \quad (2-18)$$

$$z_3 = w_7 + w_8 + 2w_9 + w_{10} \quad (2-19)$$

$$2z_4 = w_2 + w_3 + w_4 + w_7 + w_8 + w_9 \quad (2-20)$$

$$2z_5 = w_4 + w_5 + w_6 + 3w_7 + w_9 \quad (2-21)$$

となる。ここで、 $+1$ スピンの確率変数 x_1 と -1 スピンの確率変数 x_2 の差を磁化 m と定義する。

$$m = x_1 - x_2 \quad (2-22)$$

このとき、確率変数 x_i, y_i, v_i は m を用いて以下に与えられる。 (2-23)

$$x_1 = (1+m)/2 \quad (2-24)$$

$$x_2 = (1-m)/2 \quad (2-25)$$

$$y_1 = v_2 = (1+3m)/6 \quad (2-26)$$

$$y_2 = 1/3 \quad (2-27)$$

$$y_3 = v_1 = (1-3m)/6 \quad (2-28)$$

次に、変数 Δ を次式で定義する。

$$z_4 \equiv (1+6\Delta)/12 \quad (2-29)$$

$z_2 = v_2, z_3 = v_1$ に注意して、(2-15) (2-16) (2-26) (2-26) (2-29) を用いると、 z_1, z_5 が以下に与えられる。

$$z_1 = (1-6\Delta-6m)/12 \quad (2-30)$$

$$z_2 = (1+3m)/6 \quad (2-31)$$

$$z_3 = (1-3m)/6 \quad (2-32)$$

$$z_5 = (1-6\Delta+6m)/12 \quad (2-33)$$

これから、 z_i と w_i の関係とエントロピーが最大(極大)である条件を用いて、独立変数を決定する。

エントロピーの極大条件は、(2-8)を確率変数 $p_i^{(k)}$ に関する変分を0と置くと次式であ

る。

$$\begin{aligned} \delta S_5 = -Nk [& 2 \sum_i \lambda_i \ln p_i^{(3)} \delta p_i^{(3)} - 3 \sum_i \lambda_i^{(4)} \ln p_i^{(4)} \delta p_i^{(4)} \\ & + \sum_i \lambda_i^{(5)} \ln p_i^{(5)} \delta p_i^{(5)}] \end{aligned} \quad (2-34)$$

したがって $p_i^{(5)} = w_i$ について

$$\begin{aligned} & \sum_i \lambda_i \ln w_i \delta w_i \\ = & \ln w_1 \delta w_1 + 6 \ln w_2 \delta w_2 + 3 \ln w_3 \delta w_3 + 6 \ln w_4 \delta w_4 + 2 \ln w_5 \delta w_5 \\ & + \ln w_6 \delta w_6 + 6 \ln w_7 \delta w_7 + 3 \ln w_8 \delta w_8 + 6 \ln w_9 \delta w_9 + 2 \ln w_{10} \delta w_{10} \\ = & 0 \end{aligned}$$

であるから

$$\ln w_i \delta w_i = 0 \quad (2-35)$$

が成立する。

また、(2-17)(2-18)(2-19)(2-20)(2-21) を変形すると、 w_i に関する独立な四式を得る。

$$w_1 + 3w_2 = c_1(m, A) \quad (2-36)$$

$$w_1 + 6w_2 + 3w_3 = c_2(m, A) \quad (2-37)$$

$$w_6 + 3w_7 = c_3(m, A) \quad (2-38)$$

$$w_6 + 6w_7 + 3w_8 = c_4(m, A) \quad (2-39)$$

ここで、 $c_1(m, A)$ $c_2(m, A)$ $c_3(m, A)$ $c_4(m, A)$ は、 m, A のある関数である。

(2-36)(2-37)(2-38)(2-39) の確率変数 $w_1, w_2, w_3, w_6, w_7, w_8$ に関する変分をとると、

$$\delta w_1 + 3 \delta w_2 = 0 \quad (2-40)$$

$$\delta w_1 + 6 \delta w_2 + 3 \delta w_3 = 0 \quad (2-41)$$

$$\delta w_6 + 3 \delta w_7 = 0 \quad (2-42)$$

$$\delta w_6 + 6 \delta w_7 + 3 \delta w_8 = 0 \quad (2-43)$$

中島幸久

となる。ラグランジの未定係数を $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ とし、(2-35)(2-40)(2-41)(2-42)(2-43)を用いると、 $w_1, w_2, w_3, w_6, w_7, w_8$ が、次式で与えられる。

$$w_1 = e^{-\alpha} e^{-\beta} \equiv t^2 u \quad (2-44)$$

$$w_2 = e^{-\alpha/2} e^{-\beta} \equiv t u \quad (2-45)$$

$$w_3 = e^{-\beta} \equiv u \quad (2-46)$$

$$w_6 = e^{-\gamma} e^{-\delta} \equiv s^2 v \quad (2-47)$$

$$w_7 = e^{-\gamma/2} e^{-\delta} \equiv s v \quad (2-48)$$

$$w_8 = e^{-\delta} \equiv v \quad (2-49)$$

ただし、 $t \equiv e^{-\alpha/2}$, $u \equiv e^{-\beta}$, $s \equiv e^{-\gamma/2}$, $v \equiv e^{-\delta}$ である。

(2-44)(2-45)(2-46)(2-47)(2-48)(2-49), 及び先に求めた(2-29)(2-30)(2-31)(2-32)(2-33)を(2-17)(2-18)(2-19)(2-20)(2-21)に代入すると次式を得る。

$$(1-6\Delta-2m)/6 = t^2 u + 3tu + w_4 + w_9 + w_{10} \quad (2-50)$$

$$(1+3m)/6 = tu + u + 2w_4 + w_5 \quad (2-51)$$

$$(1-3m)/6 = sv + v + 2w_9 + w_{10} \quad (2-52)$$

$$(1+6\Delta)/6 = tu + u + w_4 + sv + v + w_9 \quad (2-53)$$

$$(1-6\Delta+6m)/6 = w_4 + w_5 + s^2 v + 3sv + w_9 \quad (2-54)$$

このとき、 t, u, s, v を独立変数として、 $w_4, w_5, w_9, w_{10}, \Delta$ を求めると、

$$w_4 = (1-3m)/12 - u(t^2 + 4t + 1)/2 \quad (2-55)$$

$$w_5 = u(t^2 + 3t) + m \quad (2-56)$$

$$w_9 = (1+3m)/12 - v(s^2 + 4s + 1)/2 \quad (2-57)$$

$$w_{10} = v(t^2 + 3s) - m \quad (2-58)$$

$$\Delta = \{u(t^2 + 2t - 1) + v(s^2 + 2s - 1)\}/2 \quad (2-59)$$

である。ただし、磁化 m は、すべての確率変数は、0以上、1以下であることより、

$$-1/3 \leq m \leq 1/3 \quad (2-60)$$

となる。 $|m|=0$, $1/3$ はそれぞれ多数派スピンと少数派スピンの比が1:1, 2:1に対応している。

以上から、独立変数が t, u, s, v の4つで確率変数 $p_i^{(k)}$ ($k=1, 2, 3, 4, 5$) は与えられる。したがってエントロピー S_5 は、4つの独立変数 t, u, s, v の関数となる。

$$S_5 = S_5(t, u, s, v; m) \quad (2-61)$$

(2-61) から、4変数の最大値を解析的に求めることは困難であるので、数値解を求めた。図2-4は、このようにして求めたエントロピーと磁化 m の関係である。また、図2-5は、エントロピー最大時の確率変数 w_i と磁化 m の関係である。図2-4、図2-5のいずれにも、異常性は見られない。

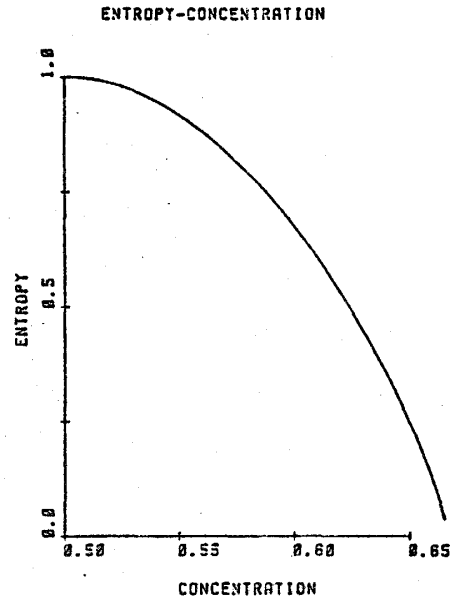
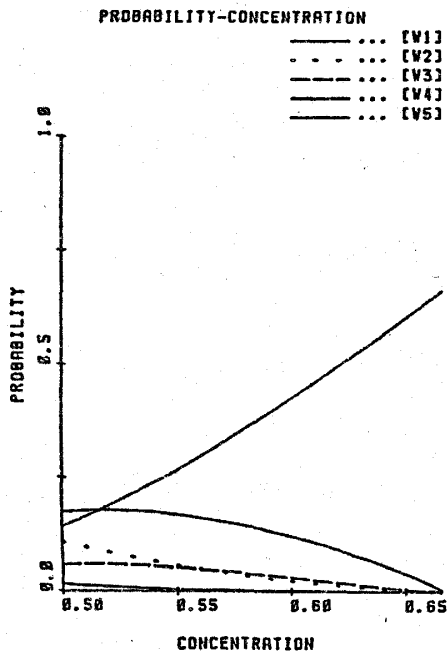
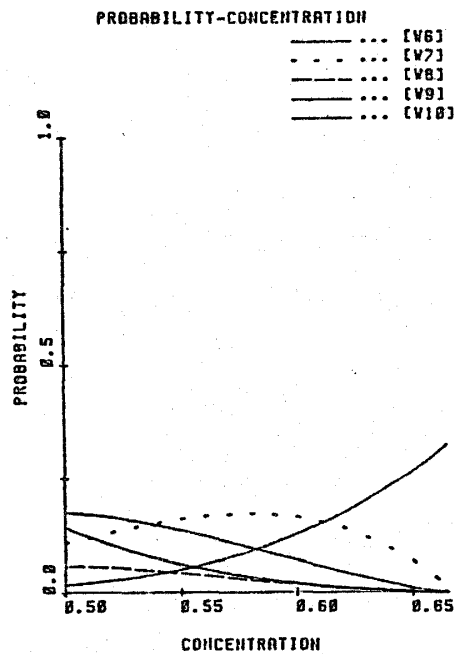


図2-4 エントロピーの濃度変化



(A)



(B)

図2-5 最小正六角形のスピン配位の出現確率

(A)は W_1 から W_5 , (B)は W_6 から W_{10} でいずれも $\lambda_i^{(e)}$ ($i=1, 2, \dots, 10$) を考慮してある。

(4) 基本要素

基本図形を最小正六角形としたスピン配位を便宜上、基本要素と呼ぶ。(図2-3(E))

2-2節 運動法則の導入

完全にフラストレートした系の特徴を生かした運動法則を導入する。すなわち『基底状態の一つで、一組の隣接対が相互に状態を交換しても相変わらず基底状態になっているならば、その状態交換は許される。

状態交換による動きは、位相空間上のランダム、ウォークである』と定める。

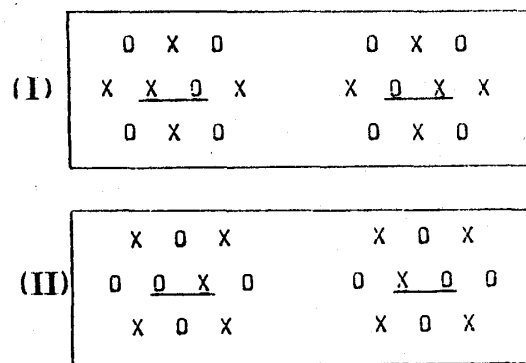


図2-6 運動法則

(I)は5と9の交換, (II)は4と10の交換, 下線を引いた対は状態交換可能である。

この運動法則は、多数派スピンと少数派スピンの数を保存する。

基本要素で運動法則をながめると、隣接対の一方が4(または9)の状態、他方が10(または5)に属しているときに限ってその一对の状態交換が可能である。(図2-6)

この状態交換は、格子気体でみると、粒子の動きに対応する。

ここで導入する運動法則は、直接、基底状態と基底状態を結ぶものであり、一種の Kinetic Ising 模型的である。

2-3節 スピン対相関

空間的に連続して、二組のスピン対の状態交換をする動きについて述べる。

一格子点を共有する二組のスピン対について、その中の一方の対の状態交換が可能であり、その状態交換で他方の組の状態交換が可能になる相関のことを、隣接スピン対相関、二組のスピン対の4つの格子点がいずれも異なるとき、その中の一方の対の状態交換が可動であり、その交換により他方の対の状態交換が可能となる相関のことを、非隣接スピン対相関と名付ける。

隣接スピン対相関は、一方の状態が連続して $2a_0$ (a_0 は格子間隔) 進むとみなせる。非隣接スピン対相関は一方の状態はそれぞれ a_0 しか進まないが、パターンの伝播がある。そこで隣接スピン対相関は動きとして粒子性、非隣接スピン対相関は、動きとして波動性である。一般

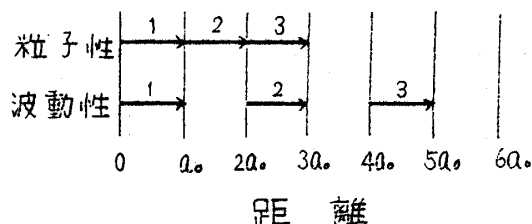


図 2-7 粒子性と波動性

に粒子的な動きよりも、波動的な動きの方が、速度が2倍速い。(図 2-7)

第3章 乱れの分析

本章では、乱れの定義と分類を行い、それらの諸特性を調べる。また系の静的性質及び動的性質を理解するために基底状態のスピン配位をグラフを用いて表示することを考える。最後に動きを Monte Carlo 法で調べる。

3-1 節 乱れの定義と分類

三角格子反強磁性 Ising 基底状態の配位の特徴を具体的に分析するために、先ず理解しやすい最大磁化付近の配位を詳細に調べる。

多数派スピンと少数派スピンの比が $2:1$ のときは、多数派が蜂の巣格子、少数派が三角格子を形成する。(図 3-1) これは、一方の状態だけに注目すると、規則正しく配列した単結晶の原子モデルに対応している。そこで、この状態からのずれを乱れと呼ぶ。

最大磁化の単結晶状態において、多数派スピンの一つが、少数派スピンにおきかわった状態を点欠陥(図 3-2)と呼ぶ。点欠陥は、単結晶中を自由に動くことができる。

一方、多結晶的配位として、二種類の結晶境界ができる。一つは、結晶境界が梯子状に配位した状態(図 3-3)、もう一つは、それが階段状に配位した状態(図 3-4)である。そこで、前者を梯子状境界、後者を階段状境界と呼ぶ。境界で区切られた二つの単結晶領域の副格子は異なっている。

真直ぐに無限に伸びた梯子状境界は動くことができない。それに対して階段状境界は、境界のもつ制約のために全くの自由ではないが可動である。このときの動いた痕跡は、梯子状境界

の屈折部と見なすことができる。

3-2節 等高グラフ

系の静的性質及び動的性質を理解するために本節でフラストレートボンドの双対グラフを導入する。このグラフは、等高線に対応している。

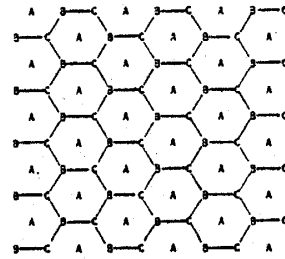
(1) 等高グラフ

最隣接対が平行なスピンをもつフラストレートボンドに着目してフラストレートボンドの双対グラフを定義する。

『フラストレートボンドBCを共有する正三角形ABCと正三角形A'BCにおいて、線分AA'をフラストレートボンドBCの双対グラフとする。』（図3-5）

基底状態に限ると、格子点A, A'はともに格子点BCと反平行なスピンである。また、定義

(A)



(B)

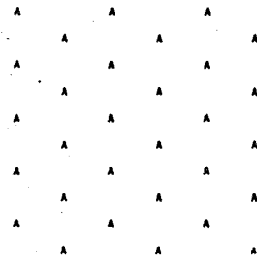


図3-1 最大磁化の配位

ただし図3-1~図3-4で(B)は(A)の配位のうち少数派スピンのみを示したものである。(A), (B) いずれも副格子上に示した。

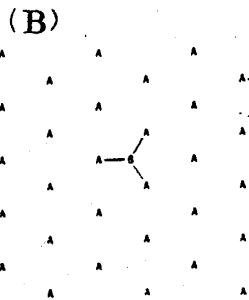
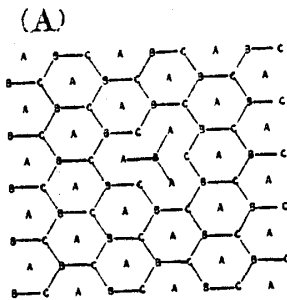


図3-2 点欠陥

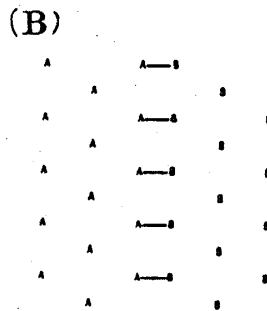
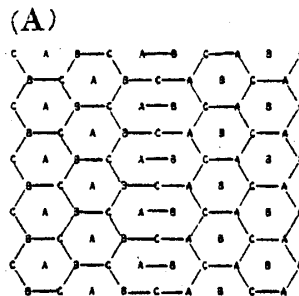


図3-3 梯子状境界

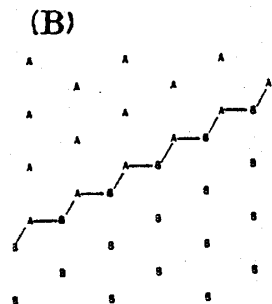
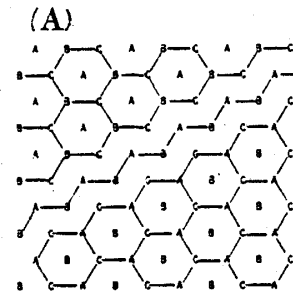


図3-4 階段状境界

から、フラストレートボンドの双対グラフは、同一種類の副格子のみを通るグラフである。そこで、副格子間に以下のように周期的な順序を定めると、最隣接な異なる二つの副格子 X と Y ($X = A, B, C; Y = A, B, C; X \neq Y$) を通る二種類の双対グラフ間に、相対的な高度を定義することができる。

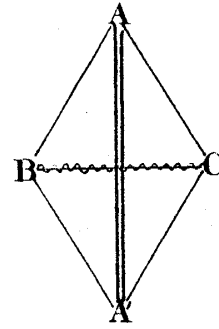


図3-5 等高グラフ(フラストレートボンドの双対グラフ)
 —— (実線) はフラストレートしていないボンド
 ~~~~~ (波線) はフラストレートボンド  
 == (二重線) は等高グラフ(フラストレートボンドの双対グラフ)

① 副格子間の順序

「三角格子の三つの副格子  $A B C$  に周期的な順序を与え、 $A \rightarrow B \rightarrow C$  の順を正の順序、 $A \rightarrow C \rightarrow B$  の順を負の順序と定める。」

② 双対グラフ間の高度

「三角格子の最隣接な副格子  $X$  と  $Y$  を通る異なる二本の双対グラフ  $\tilde{X}$  と  $\tilde{Y}$  において、 $X$  からみて  $Y$  が正の順序なら、 $\tilde{X}$  は  $\tilde{Y}$  より高度が高いと呼び、それが負の順序なら、 $\tilde{X}$  は  $\tilde{Y}$  より高度が低いと呼ぶ。」

このため、フラストレートボンドの双対グラフは、等高線に対応する。そこでこれを等高グラフと呼ぶ。

(2) 基本要素と等高グラフ

基本要素を等高グラフで表わすと(図3-6)、格子点上の等高グラフの幾何学的状態が5種類求まる。そして、いずれも次の性質を備えている。

(i) 格子点上での等高グラフの交わりは、偶数本である。(0, 2, 4本)

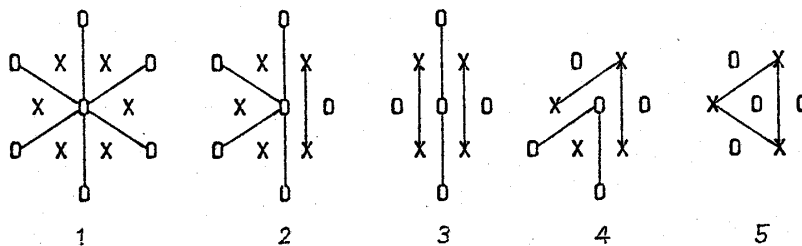


図3-6 基本要素の等高グラフ表示

中島幸久

(ii) 着目している格子点からみた線分と線分の間の基本となる角度は、60度及180度に限る。

### (3) 乱れの基本配位と等高グラフ

点欠陥、梯子状境界、階段状境界を等高グラフで表わす。(図3-7)

点欠陥は、単結晶部分と別の副格子で、辺が $\sqrt{3}a_0$  ( $a_0$ は格子間隔)の正三角形となる。そこで以後、 $\sqrt{3}$ 正三角形と呼ぶ。

梯子状境界は、無限に伸びた直線になり、階段状境界は、鋸状になる。いずれも境界の両側では、副格子が異なっている。

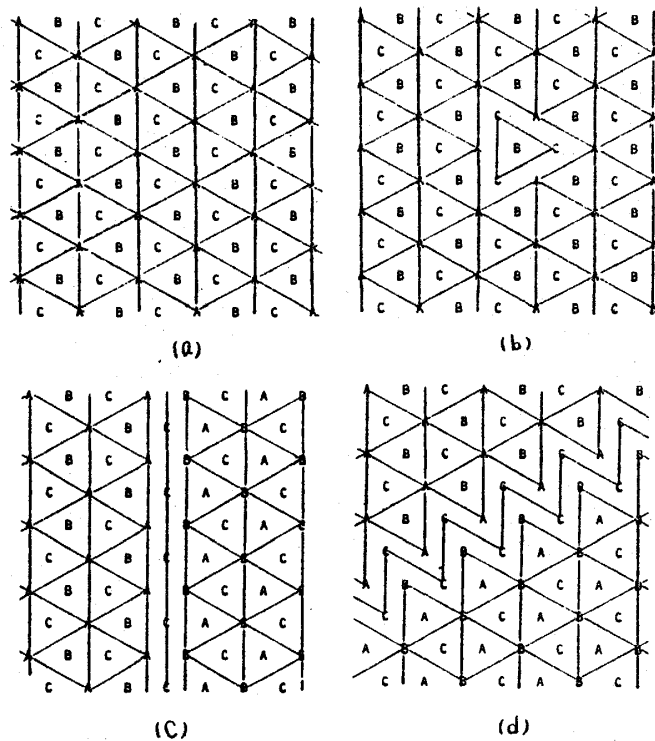


図3-7 乱れの基本配位と等高グラフ表示  
(a)は最大磁化の配位, (b)は点欠陥, (c)は梯子状境界,  
(d)は階段状境界

### (4) 運動法則と等高グラフ

運動法則を等高グラフで再び定義することを考える。図3-8は、X(up-spin)とO(down-spin)で示した運動法則を等高グラフで示したものである。この図から運動法則はグラフで以下のようにいうことができる。

『ある $\sqrt{3}$ 正三角形の頂点が、その $\sqrt{3}$ 正三角形のみに属するならば、この $\sqrt{3}$ 正三角形の頂点と重心の状態交換が可能である。』



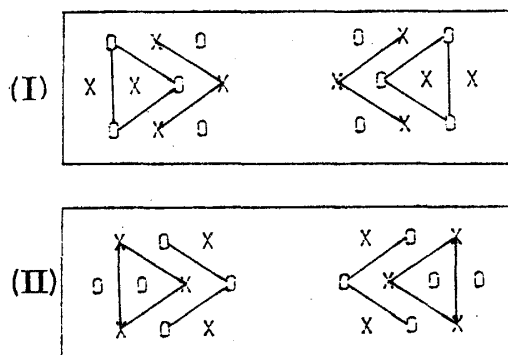


図 3-8 運動法則の等高グラフ表示  
 (I) は 5 と 9 の交換  
 (II) は 4 と 10 の交換

状態交換する  $\sqrt{3}$  正三角形の頂点と重心の垂直二等分線で、 $\sqrt{3}$  正三角形を対称変換した結果が、動いた後の配位である。

図 3-9 にフラストレートボンドで示したスピン配位と、等高グラフで示したスピン配位を比較した。

### 3-3 節 点欠陥と梯子状境界

本節、及び次節では、乱れの基本要素の一つの配位と点欠陥が、接近することで生じる特徴的な振舞いについて述べる。

梯子状境界は、不動境界である。ところがここに点欠陥が付着すると、それらが付着の前とは異なった様相を与える。

図 3-10 は、梯子状境界の一方の側から点欠陥が梯子状境界に付着する前後の様子を示すものである。

梯子状境界に一個の点欠陥が付着した瞬間、キンワ・反キンワの対発生に相当する配位が生じる。(図 3-10(b)) これらは、一種の磁壁キンワと磁壁反キンワの対のようにみることができる。この対は、互いに離れることができ、梯子状境界を部分的に平行にずらしたような形を作って梯子状境界に沿う動きを可能にする。しかし、点欠陥としては、梯子状境界を越えて反対側に脱出することはできない。

ところが、点欠陥が二個、梯子状境界の同じ側に付着したときには、一方の点欠陥から対発生したキンワと、他方の点欠陥から対発生した反キンワが、キンワ・反キンワの対消滅によって一個の点欠陥が境界の反対側に脱出することができる。(図 3-11)

このような現象は定量化しにくく、単なる平均では見落されてしまう事柄である。

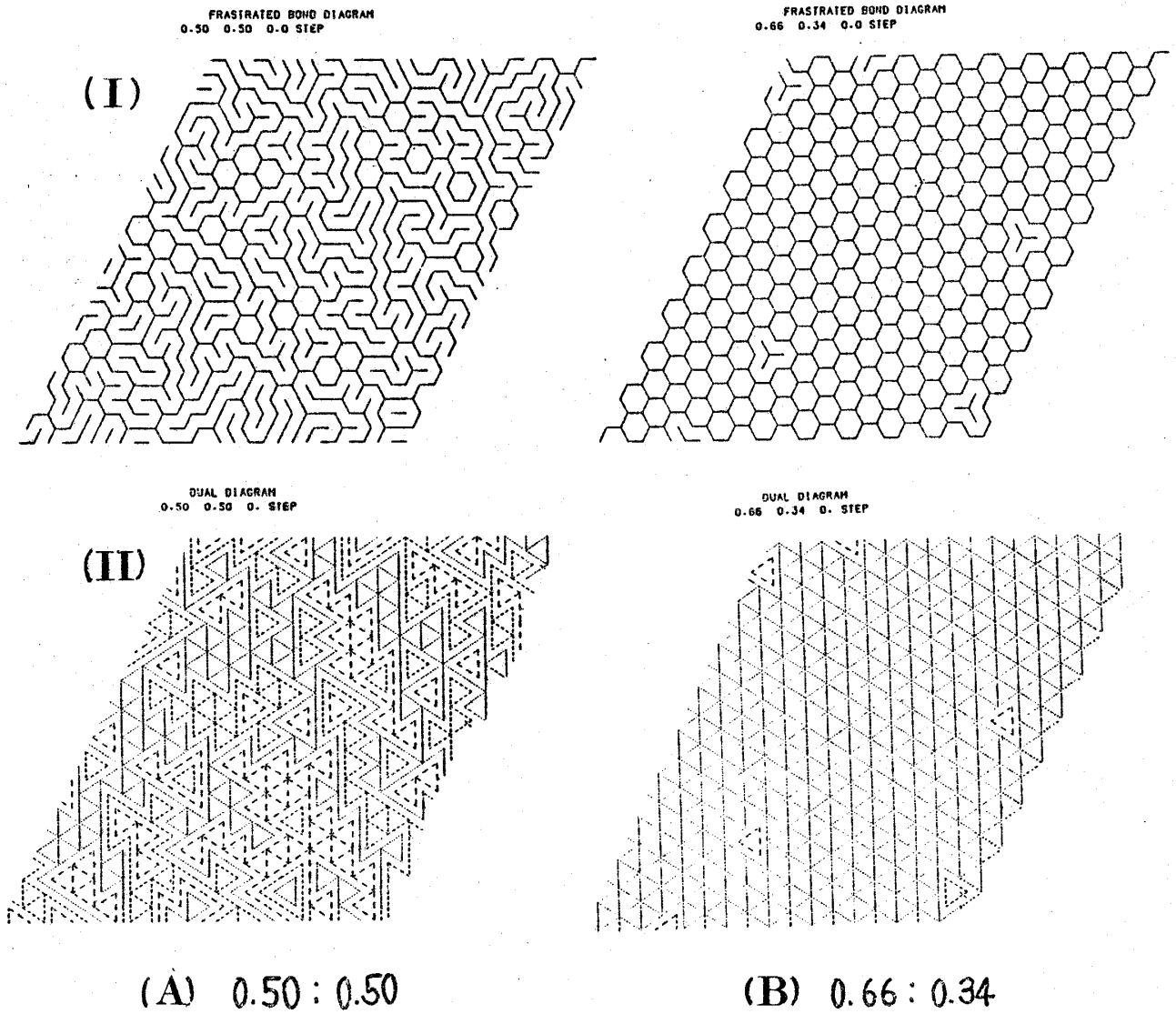


図3-9 フラストレートボンドで示した表示と等高グラフで示した表示  
 ( (I)はフラストレートボンド, (II)は等高グラフ)

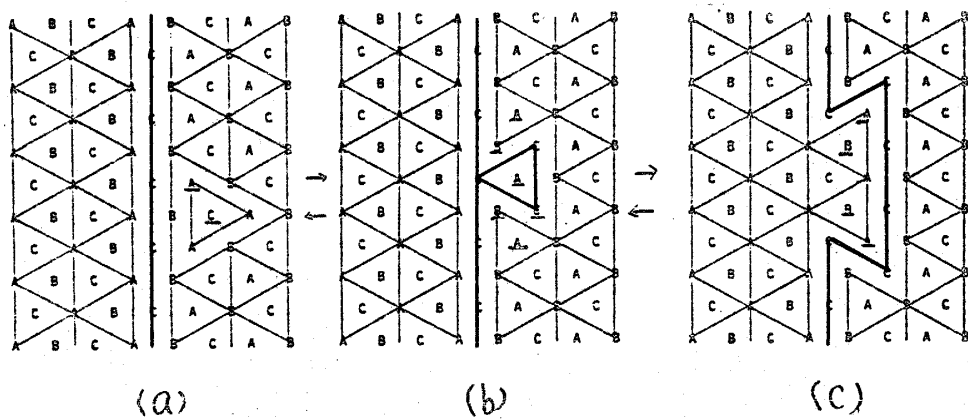


図3-10 梯子状境界に点欠陥が1個付着した場合の振舞(キック, 反キック)

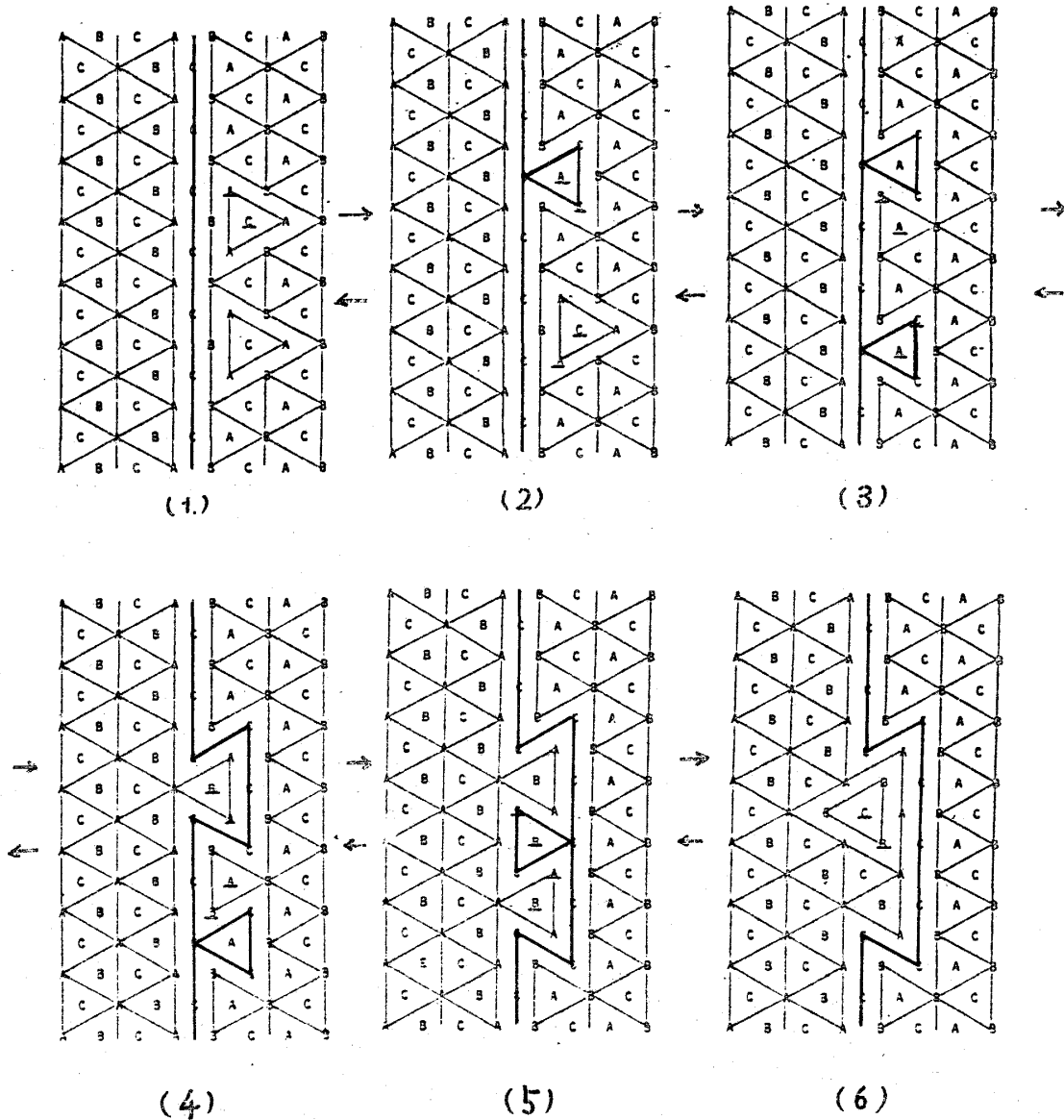


図3-11 梯子状境界に同じ側から点欠陥が2個付着した場合の振舞

### 3-4節 キンクの伝播性の推定

#### (1) 等高グラフによるキンクの伝播性の推定

キンク(または反キンク)の動きを一般化し、等高グラフを用いて動きの伝播性を推定する方法を述べる。

キンクの動きは、頂点を共有する2つの $\sqrt{3}$ 正三角形の一方が動いたことにより、他方が可動となる波動様式である。このことは、一方の $\sqrt{3}$ 正三角形を消去したとき、他方の $\sqrt{3}$ 正三角形が可動となれば、キンクの動きが伝播するといえる。そこで、以下の手順に従って等高グラフ上でキンクの伝播性を推定することができる。

(I) 現在の配位で、可動な $\sqrt{3}$ 正三角形を彩色する。(すなわち $\triangle \rightarrow \blacktriangle$ とする)

中島幸久

(II) (I) で彩色した部分を消去した上で、可動な  $\sqrt{3}$  正三角形を彩色する。(II) で新たに彩色された  $\sqrt{3}$  正三角形が、(I) の動きにより可動になる部分である。

(III) (I) → (II) の関係を逐次くりかえすことにより、キングの波動伝播をしようる範囲を推定することができる。

図 3-12 は、梯子状境界の屈折部、階段状境界の屈折部、および梯子状境界の一つのキング部分のキングの伝播領域を推定したものである。

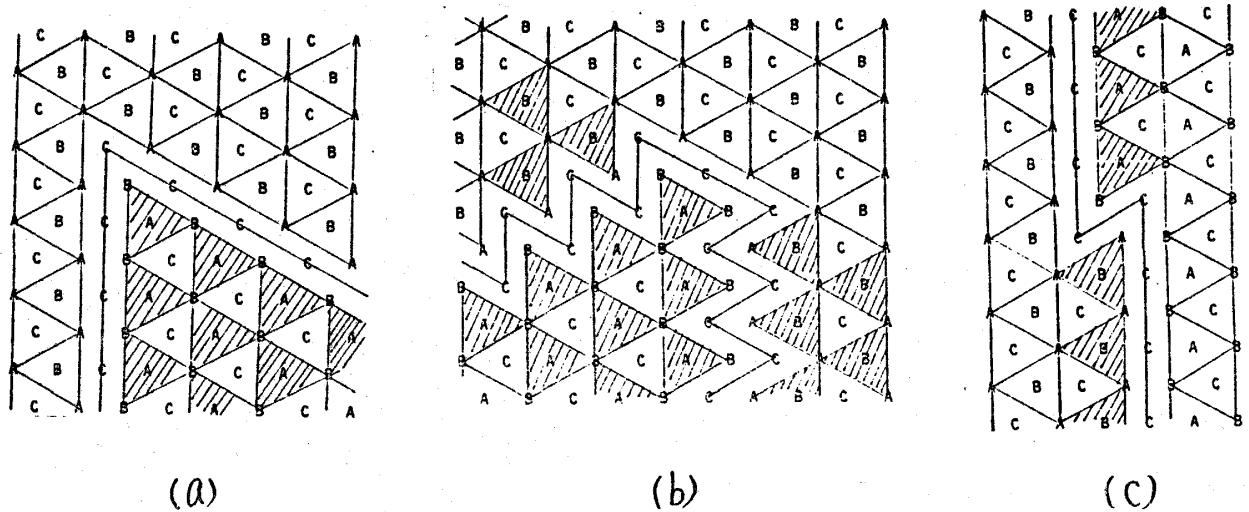


図 3-12 キングの伝播性の推定  
 (a) は梯子状境界の屈折部  
 (b) は階段状境界の屈折部  
 (c) は梯子状境界中の 1 個のキング部分  
 斜線の  $\sqrt{3}$  正三角形がキングの伝播により動く範囲

## (2) 伝播性の指数づけ

ある  $\sqrt{3}$  正三角形を動かすために、動かさなければならない(消去しなければならない)  $\sqrt{3}$  正三角形の総数を、その位置におけるキングの伝播性の目安にすることができる。たとえば、現在可動な  $\sqrt{3}$  正三角形は 0 であり、この値が大きくなるにつれて、キング型の波動伝達が起こりにくいことを意味する。

図 3-13 は、梯子状境界の屈折部(図 3-12(a))の  $\sqrt{3}$  正三角形に指数づけをしたものである。

## 3-5 節 点欠陥とループ状境界

点欠陥と境界の動きによる関係を本節で述べる。

### (1) ループ状境界

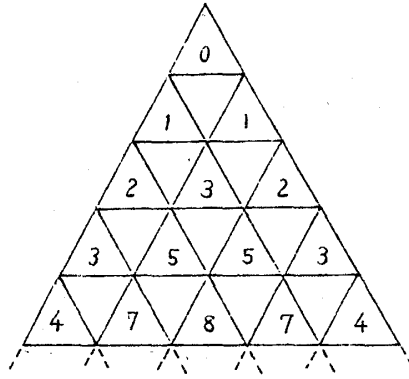


図3-13 キンク伝播性の指数づけ  
(梯子状境界の屈接部)

点欠陥が一個，単結晶的配位中を動くときは，自由に動くことができる。それに対して，単結晶的配位中で，一カ所に複数の点欠陥が集まると一個だけとは異なる動的性質，並びに配位が実現する。

今，点欠陥  $C^*$  に点欠陥  $A^*$  が接近すると， $A^*$  が接近する前は不動であった  $C^*$  が，可動となる。そこで  $C^*$  が動くと，単結晶中に閉じた境界であるループ状境界ができる。(図3-14)

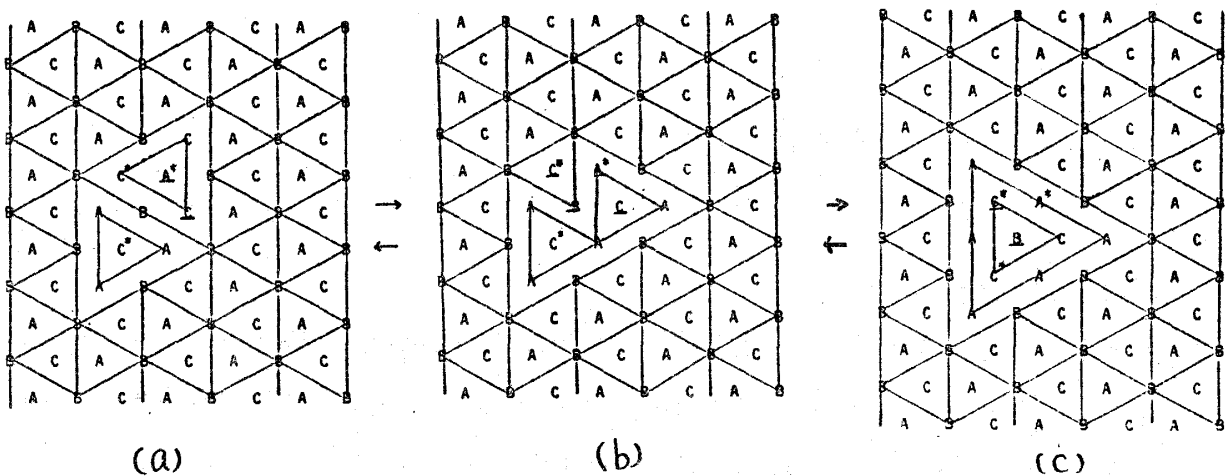


図3-14 2個の点欠陥から生成されたループ状境界

一般にループ状境界は，梯子状境界と階段状境界が組み合わさった閉じた境界であり，多くの点欠陥の集合により生成されたものほど，等高グラフの周長が長い。

ループ状境界は，階段状境界の動きで，梯子状境界と階段状境界の別の組合せとなることがある。この時，梯子状境界部分が増加し，階段状境界部分が減少する変形と，その逆の変形がある。梯子状境界の不可動性と階段状境界の可動性から，先の変形はループ状境界の全体の動

中島幸久

きが増加する変形である。

梯子状境界部分が増加する変形を連続して続けると、最後にその変形ができない配位になる。これは、系全体の動きが最も小さいループ状境界であり、等高グラフは、階段状部分を頂点とする正三角形となる。この配位は最も動きにくいという意味からループ状境界の最深部分に相当する。(図3-15)

## (2) ループ状境界と保存則

ループ状境界の最深部の可動部分は、正三角形の頂点だけで、合計3カ所である。このとき一方の状態が動く方向は、いずれも正三角形の頂点から重心に向う向き(あるいは、正三角形の重心から頂点に向う向き)である。そこで、この方向と大きさ1をもつベクトル(動きのベクトル)を定めると、ベクトルのループ状境界全体の総和が0となる。この性質は、ループ状境界の最深部から階段状境界が増加する変形を行い、1個の点欠陥が生成される直前まで保存されている。(図3-16)

動きのベクトルの総和が0であることは、ループ状境界全体の変形が等方的であることを意味する。

動きのベクトルの総和が0となるループ状境界の変形は、閉じた等高グラフの局長を保存する。(図3-17) 一般に $N$ 個( $N=2, 3, \dots$ )の点欠陥で生成されたループ状境界の周長 $L_N$ は、

$$L_N = 3\sqrt{3} a_0 N \quad (a_0 \text{ は格子間隔}) \quad (3-1)$$

である。

## (3) ループ状境界の寿命

$N$ 個の点欠陥から生成されたループ状境界( $N$ 型ループ状境界)の最深部から、階段状境界部分が増加する変形を行い、はじめて1個の点欠陥が生成するまでの状態交換回数を「寿命」と呼ぶ。以下では、 $N$ 型ループ状境界の最長寿命を求める。

図3-18は、 $N=2, 3, 4, 5$ について、 $N$ 型ループ状境界の最深部から点欠陥が生成されるまでの変形の過程を示したものである。これより最短寿命を( $N=1$ )( $N=2, 3, 4, 5, \dots$ )と仮定する。

点欠陥が生成した直後の配位は、( $N-1$ )型ループ状境界に点欠陥が1個付いたものである。 $N$ 型ループ状境界の寿命に幅があるのは、( $N-1$ )型ループ状境界の保存則(3-5節(2))が成り立つ配位が、複数存在することによる。すなわち、 $N$ 型ループ状境界の寿命の幅は、( $N-1$ )型ループ状境界の保存則の成立する過程数(最大寿命)に等しい。

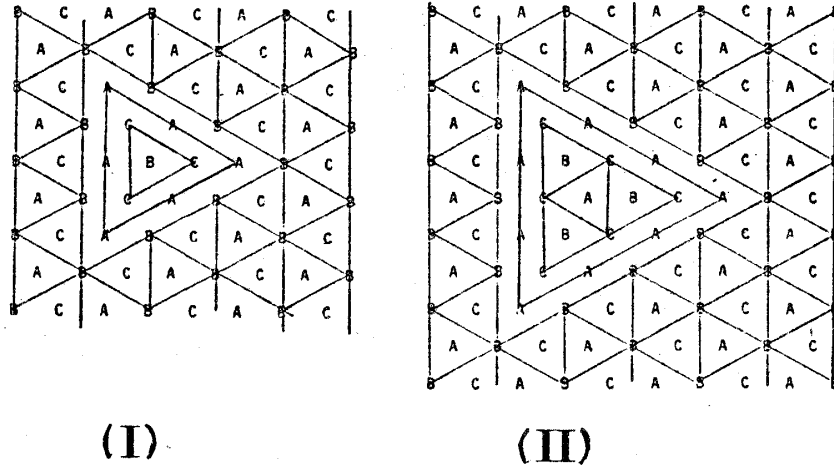


図3-15 ループ状境界の最深部  
 (I) は2個の点欠陥から生成されたもの  
 (II) は3個の点欠陥から生成されたもの

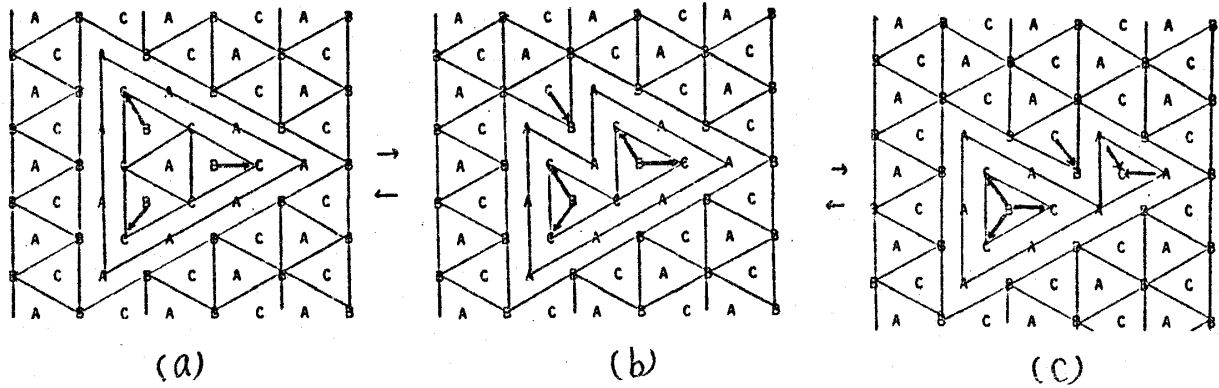


図3-16 動きのベクトル  
 ((a)と(b)は動きのベクトルの総和は $\vec{0}$ ,  
 (c)はそれが $\vec{0}$ ではない。)

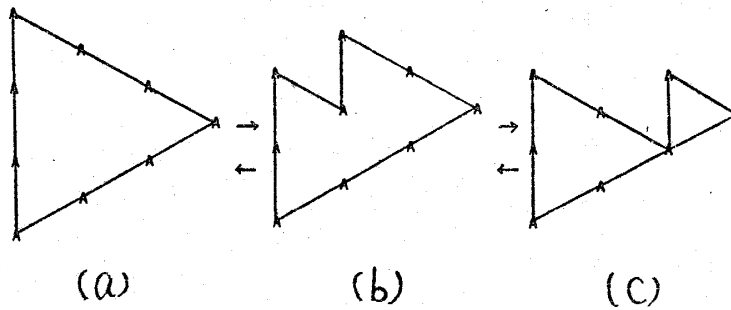


図3-17 N型ループ状境界の周長;  $L$   
 ((a)と(b)は $L = I_3 (= 9\sqrt{3} a_0)$ , (c)は $L \neq L_3$ ;  $a_0$  は格子間隔

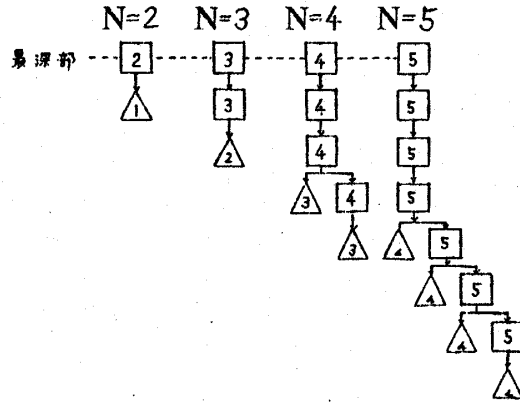


図3-18 N型ループ状境界の最深部から点欠陥生成までの変形過程  
 図はN型ループ状境界の保存則が成立する配位。  
 $\Delta$ はN型ループ状境界の保存則が成立する配位に点欠陥が1個ついた配位。  
 $\rightarrow$ は階段状境界部分が増加する一回の状態変換。

よって、最大寿命と最小寿命の差は、 $(N-1)$ 型の最大寿命から1を引いた数になる。

N型ループ状境界の最大寿命、最小寿命をそれぞれ、 $\tau_{N,max}$ 、 $\tau_{N,min}$  とかくと、

$$\begin{aligned} \tau_{N,max} &= \tau_{N,min} + (\tau_{N,max} - \tau_{N,min}) \\ &= (N-1) + (\tau_{N-1,max} - 1) \\ &= \tau_{N-1,max} + (N-2) \end{aligned} \tag{3-2}$$

となる。したがって

$$\tau_{N,max} = \frac{1}{2} (N-1)(N-2) \tag{3-3}$$

となる。

次に、N型ループ状境界の最深部から、N個の点欠陥に完全に分解するまでの最短交換数を求める。この変形は、N型、 $(N-1)$ 型、 $\dots$  2型の種々の経路を通ることができるが、先の議論から、総交換数は経路によらず一定である。

したがって、N型から2型までの最短寿命の総和が、求める総交換数  $S_N$  となる。

$$\begin{aligned} S_N &= \sum_{k=2}^N \tau_{N,min} \\ &= 0 + 1 + 2 + \dots + (N-1) = \frac{1}{2} N(N-1) \end{aligned} \tag{3-4}$$



$N$ 型ループ状境界と点欠陥の関係は、 $N$ の2乗に従って弱まるとみることができる。

### 3-6節 Monte Carlo 法による動的性質

本節では、運動法則に従う動きを、計算機を用いて Monte Carlo 法で分析する。

#### (1) シミュレーションの方法

第一段階で、三角格子反強磁性基底状態の中のある状態を実現させる。

第二段階で、第一段階で得られた状態を初期状態として、Monte Carlo 法を始める。

##### ① 三角格子反強磁性基底状態の実現

(i) 多数派スピンと少数派スピンの個数を与える。(ただし、両者の和は、格子点の総数と一致させる。) このとき、格子点の総数に対する一方の状態の比率を、濃度と呼ぶ。

たとえば、多数派スピンと少数派スピンの比が2:1のとき、前者の濃度は0.6667であり後者の濃度は0.3333である。

(ii) (i)の割合で、全く相関なしにスピンを各格子点に与える。

(iii) 乱数で隣接対を選び、状態を交換するときエネルギーが下がるか、あるいはエネルギーが等しければ状態を交換する。(乱数は、合同法  $x_{i+1} = a_x x_i + c \pmod{m}$  を用いた。

(iv) 最隣接格子点の作る正三角形のすべてが、基底状態になるまで (iii) をくりかえす。

##### ② 動きの実現

隣接対を一对選ぶ操作が時間の最小単位に相当する。したがって、可動対の少ない配位ではなかなか動きが起こらない。しかし、このことは、あらゆる配位が等確率で実現することを保障する。以下で期間 ( $N$ 回) と呼ぶのは、実際に系全体で  $N$ 回動いた期間を指す。

##### ③ 境界条件

菱形の周期的境界条件を用いる。

#### (2) 統計処理の方法

以下で用いる統計量の種類をあげる。

(a)  $X$  … 統計変数。

(b)  $E_p(X)$  … 統計変数  $X$  の三角格子反強磁性基底状態アンサンブルを母集団とした算術平均。

(c)  $V_p(X) \equiv E_p(X^2) - (E_p(X))^2$  … 統計変数  $X$  の三角格子反強磁性基底状態アンサンブルの分散。

(d)  $E_{t,s}(X)$  … 動いた回数  $s$  ごとサンプリングする統計変数  $X$  の算術的平均。

(e)  $V_{t,s}(X) \equiv E_{t,s}(X^2) - (E_{t,s}(X))^2$  … 動いた回数  $s$  ごとサンプリングで得られる統計変数  $X$  の分散。

- (f)  $E_{t,ds}(X)$  …動いた回数  $s$  ごとに全期間を分割し、期間内の代表値である統計変数  $X$  の算術平均。
- (g)  $V_{t,ds}(X) \equiv E_{t,ds}(X^2) - (E_{t,ds}(X))^2$  …動いた回数  $s$  ごとに全期間を分割し、期間内の代表値である統計変数  $X$  の分散。
- (h)  $\text{Max}(X_1, X_2, X_3)$  … 統計量  $X_1, X_2, X_3$  の最大値。
- (i)  $\text{Mid}(X_1, X_2, X_3)$  … 統計量  $X_1, X_2, X_3$  の中間値。
- (i)  $\text{Min}(X_1, X_2, X_3)$  … 統計量  $X_1, X_2, X_3$  の最小値。

### (3) 初期状態の影響の排除

初期状態の影響を排除するために、一定回数系に動きを与えてから、統計量を計測した。

(I) は 20,000 回、(II) および (III) は 24,000 回である。 ; サイズ  $27 \times 27$  )

### (4) シミュレーションの結果

動きの性質を、以下の観点に立って分析した。

- ① 格子点あたりの動きの頻度の分布が全体として一様であるか、それともムラのある動きか。
- ② 副格子対間の状態交換数が、濃度変化に対してどのような傾向であるか。
- ③ 副格子対間の状態交換数の時間経過に対するゆらぎが濃度とどんな関係か。

これらの性質は、当然統計をとる空間スケールや時間スケールによるものであるが、そのような有限スケール内でも、なんらかの性質を見出せることが重要である。

#### (I) 格子点あたりの動きの頻度分布

格子点  $(x, y)$  が、期間 (60,000 回) 内で状態交換した回数を  $N_{xy}$  とすると、格子点あたりの動きの頻度による 2 次モーメント  $M_2$  を次式で求める。

$$M_2 = \sum_x \sum_y N_{xy}^2 \quad (3-5)$$

図 3-19 は、濃度とモーメントの関係である。図 3-20 に、格子点による動きのむらを図示する。0.56 ~ 0.57 付近で動きのムラの様子が変わる。

#### (II) 副格子対間の状態交換数の濃度変化

期間 (32,000 回) の全体の動きを、パラメーター空間内に示し、濃度変化にともなって変化する点の軌跡の特徴から、動きの性質を分析する。

副格子対 A-B, B-C, C-A のこの期間の状態交換数を  $X_1, X_2, X_3$  としたとき、これを三次元パラメーター空間  $(\alpha, \beta, r)$  で表わす。ただし

$$\alpha \equiv \text{Max}(X_1, X_2, X_3) / (X_1 + X_2 + X_3) \quad (3-6)$$

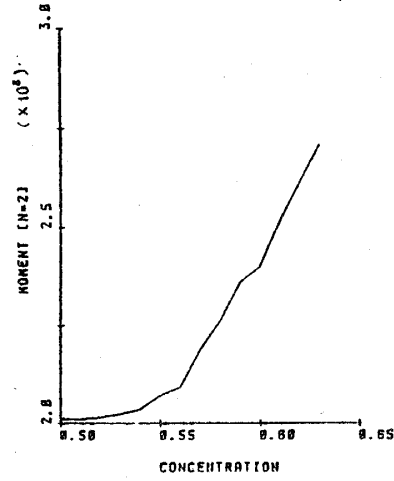
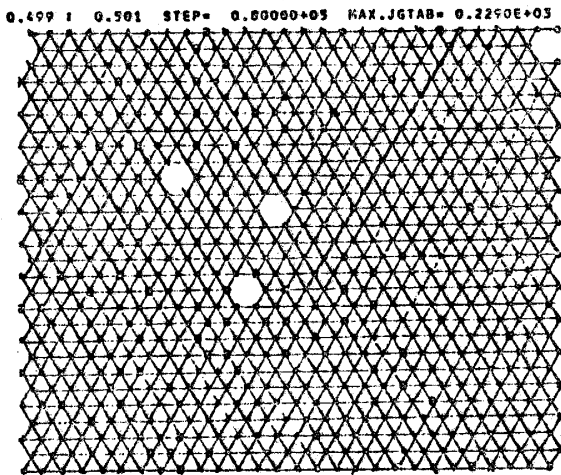
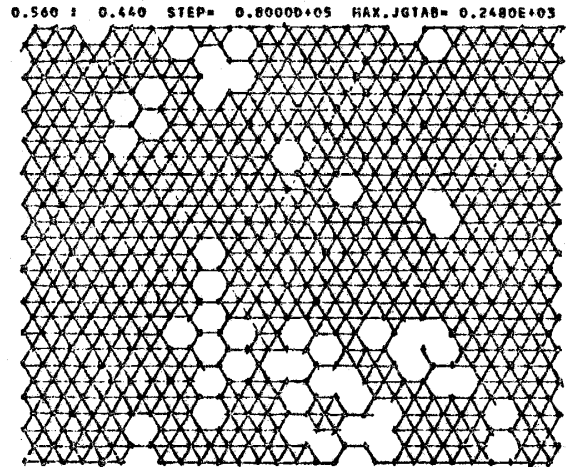


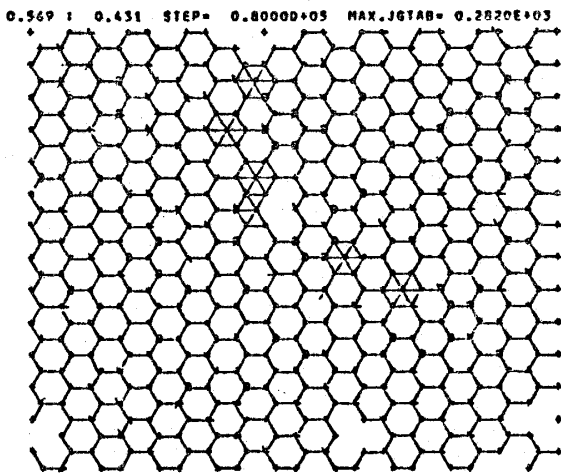
図3-19 格子点あたりの動きの頻度による2次モーメントの濃度変化



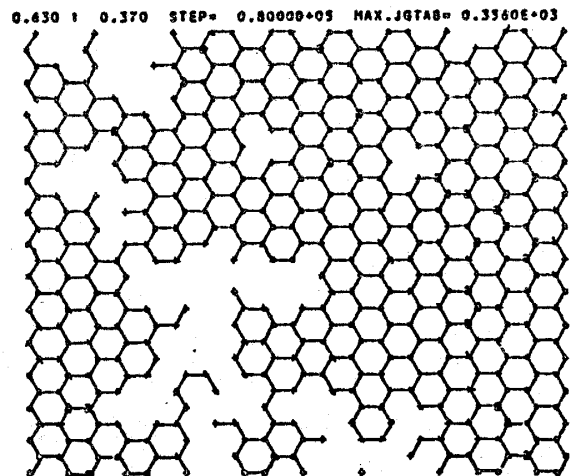
(1) 0.50: 0.50



(2) 0.56: 0.44



(3) 0.57: 0.43



(4) 0.63: 0.37

図3-20 格子点あたりの動きのムラの濃度変化  
 (最大頻度が'5'になるように動きの頻度を6段階に等分割し、そのうち'3'、'4'、'5'を表示した。)  
 (そこで最隣接な二つの格子点を結んだ。)

$$\beta \equiv \text{Mid}(X_1, X_2, X_3) / (X_1 + X_2 + X_3) \quad (3-7)$$

$$r \equiv \text{Min}(X_1, X_2, X_3) / (X_1 + X_2 + X_3) \quad (3-8)$$

である。

点  $(\alpha, \beta, r)$  は、平面  $\alpha + \beta + r = 1$  上の三点  $(1, 0, 0)$   $(1/2, 1/2, 0)$   $(1/3, 1/3, 1/3)$  で囲まれた三角形内に存在し、三角形内で点が移動する。

図 3-21 に、濃度変化に伴う点  $(\alpha, \beta, r)$  の軌跡を示す。ここで三頂点  $(1, 0, 0)$   $(1/2, 1/2, 0)$   $(1/3, 1/3, 1/3)$  は、以下の意味をもっている。

点  $(1, 0, 0)$  は、ただ一種類の副格子対のみが状態変換する。(一党独裁型の動き)

点  $(1/2, 1/2, 0)$  は、二種類の副格子対が同等に状態交換を行い、残りの副格子対の状態交換はない。(二大政党型の動き)

点  $(1/3, 1/3, 1/3)$  は、三種類の副格子対が同等に状態変換する。(三党均衡型の動き)

次に点  $(\alpha, \beta, r)$  から系全体の動きを定量化する二種類の測度を考える。

(1) ベクトル  $a = (\alpha, 0, 0)$ ,  $b = (0, \beta, 0)$ ,  $c = (0, 0, r)$  を基底とする長方体の体積  $V$

$$V = \alpha \beta r \quad (3-9)$$

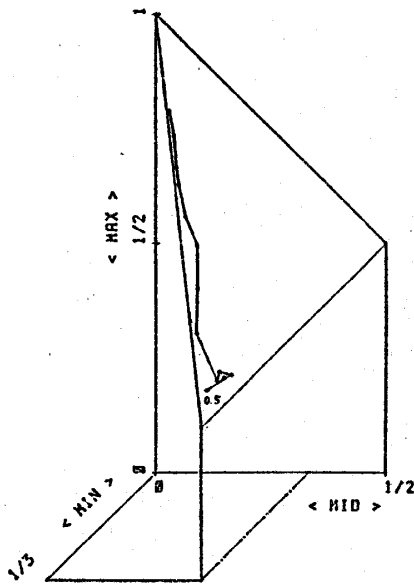


図 3-21 点  $(\alpha, \beta, r)$  の濃度変化  
(濃度は 0.50 から 0.62 まで  
0.01 きざみで変化させた。)

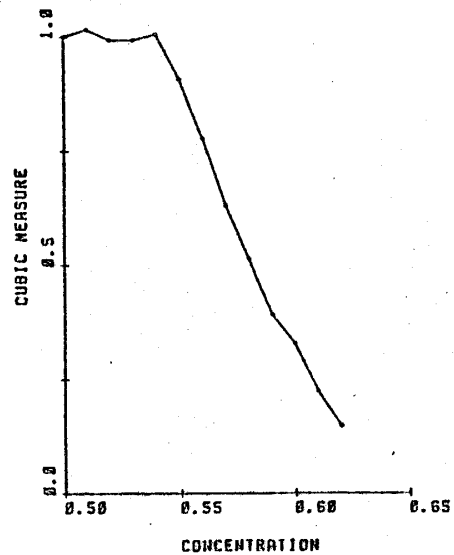


図 3-22 体積  $V$  の濃度変化  
(濃度 0.50 の時の体積を 1  
に規格化)

(2) 点  $(\alpha, 0, 0)$ ,  $(0, \beta, 0)$ ,  $(0, 0, r)$  を頂点とする三角形の面積  $S$

$$S = \sqrt{s(s-a)(s-b)(s-c)} \quad (3-10)$$

ただし,

$$a = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \quad b = \sqrt{\beta^2 + r^2}, \quad c = \sqrt{r^2 + \alpha^2}$$

$$2s = (a + b + c)$$

である。

体積  $V$  は、一党独裁型、二大政党型の動きで、0 であり、面積  $S$  は、一党独裁型の動きのときのみ、0 になる。

図 3-22, 図 3-23 にそれぞれ体積  $V$  と濃度, 面積  $S$  と濃度の関係を示す。0.54 ~ 0.55 付近で点の動きの傾向が変化している。

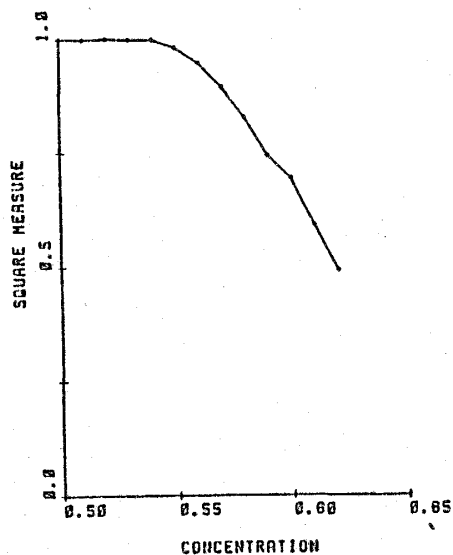


図 3-23 面積  $S$  の濃度変化  
(濃度 0.50 の時の面積を 1 に規格化)

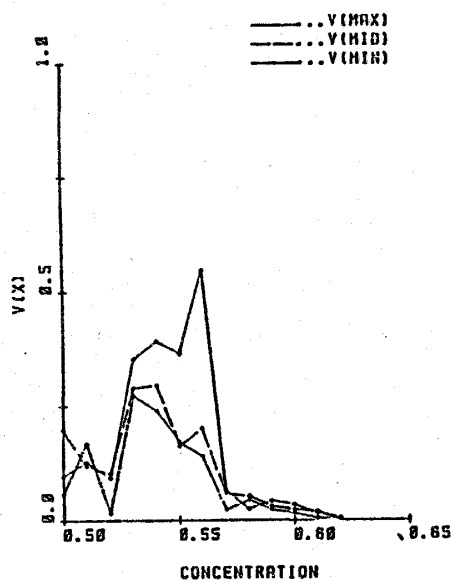


図 3-24 副格子対間の状態交換の時間経過に対するゆらぎ  
(任意スケール)

### (III) 副格子対間の状態交換数の時間経過に対するゆらぎ

三角格子の三つの副格子対 A-B, B-C, C-A 間の状態交換数を  $\Delta s = 8,000$  回ごとに計測し, それらのゆらぎ  $V_{t, \Delta s}(X)$  を求める。このとき, 交換数の程度に応じて三種類のゆらぎが与えられる。すなわち,

$$V_{t,ds}(\text{Max}(X_1, X_2, X_3))$$

$$V_{t,ds}(\text{Mid}(X_1, X_2, X_3))$$

$$V_{t,ds}(\text{Min}(X_1, X_2, X_3))$$

である。

図 3-24 に、この三種類のゆらぎと濃度の関係を示す。0.54 ~ 0.56 付近で異常的な振舞いを示す。

#### 第 4 章 長距離構造の特性

本章では、系の長距離的配位の特徴を抽出することを試みる。まず、ボロノイ多角形を用いて色によるくり込みを考える。次に局所密度の均一性について考える。

##### 4-1 節 色のくり込み

系全体で、長距離にわたる構造を支配しているのがなんであるかをきわめたせるのが、以下の一連の操作によって可能である。

- (1) 格子点上のスピンの一方の状態だけに着目したボロノイ多角形で、空間を分割する。(したがって二種類のボロノイ分割の方法がある。) このとき、5つの基本要素に対応して5種類のボロノイ多角形が存在する。(図 4-1)
- (2) 5種類のボロノイ多角形に、種類に応じた「色」 $C$  ( $C=1, 2, 3, 4, 5$ ) を与える。
- (3) 次に、次の操作に従って、同時に各多角形の色を変化させる。

「辺を共有して隣接するボロノイ多角形の中で、同一種類の色をもつ多角形の共有する辺の

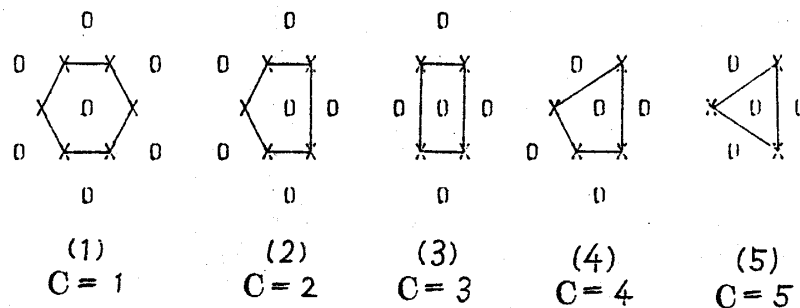


図 4-1 5種類のボロノイ多角形  
(5種類の基本要素に対応している。またCは色を示す。)

長さの合計が、最も大きい色を、中心のポロノイ多角形の色とする。(くり込む) ただし最も大きい色が複数個存在するときは、くり込みを保留する。」(図4-2)

(4) (3)の操作を全体の各色の分布が、くり込み回数に対して定常的になるまで続ける。

色Cは、一連の操作の初期状態でのみ、ポロノイ多角形の種類に一致するが、それ以降は、多角形の種類とは無関係になる。

長距離にわたる構造を、くり込んだ後の各色の分布から推定する。

図4-3は、くり込み回数と各色の個数の関係であり、図4-4は、多数派スピンの比が1:1と2:1でのくり込み前と後の各色の分布である。

#### 4-2節 局所濃度

系全体の多数派スピンと少数派スピンのそれぞれの個数で定まる濃度は、系全体で均一化された量である。この節では、局所的に濃度を定義し、空間内の濃度分布のゆらぎについて考察

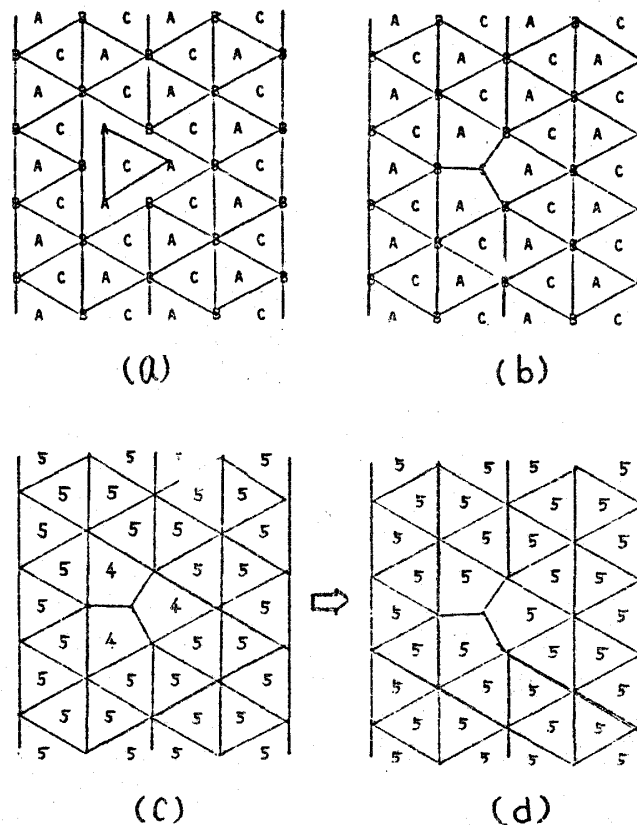


図4-2 点欠陥における色のくり込み

(a)は等高グラフ表示。

(b)は多数派スピンのポロノイ分割。

(c)は(b)のポロノイ多角形に色をつけたもの。(くり込み初期状態)

(d)は(c)におまる1回のくり込み操作後の色の分布。

ただし(c)(d)の数字は色を示す。

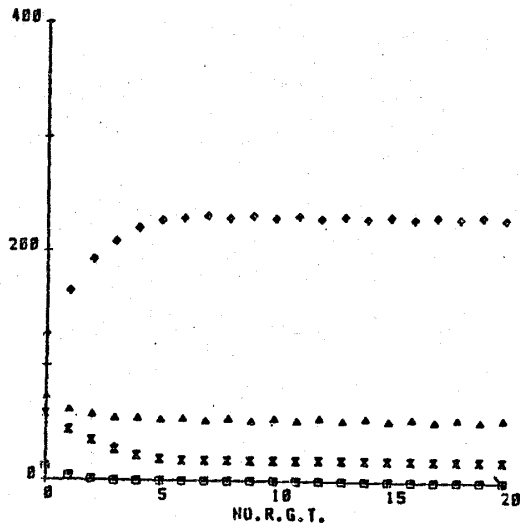


図 4-3 くり込み回数と茶色の個数の関係 (0.56 : 0.44)  
 (横軸はくり込み回数 (20 回まで),  
 縦軸は 1 ~ 5 の色の個数)

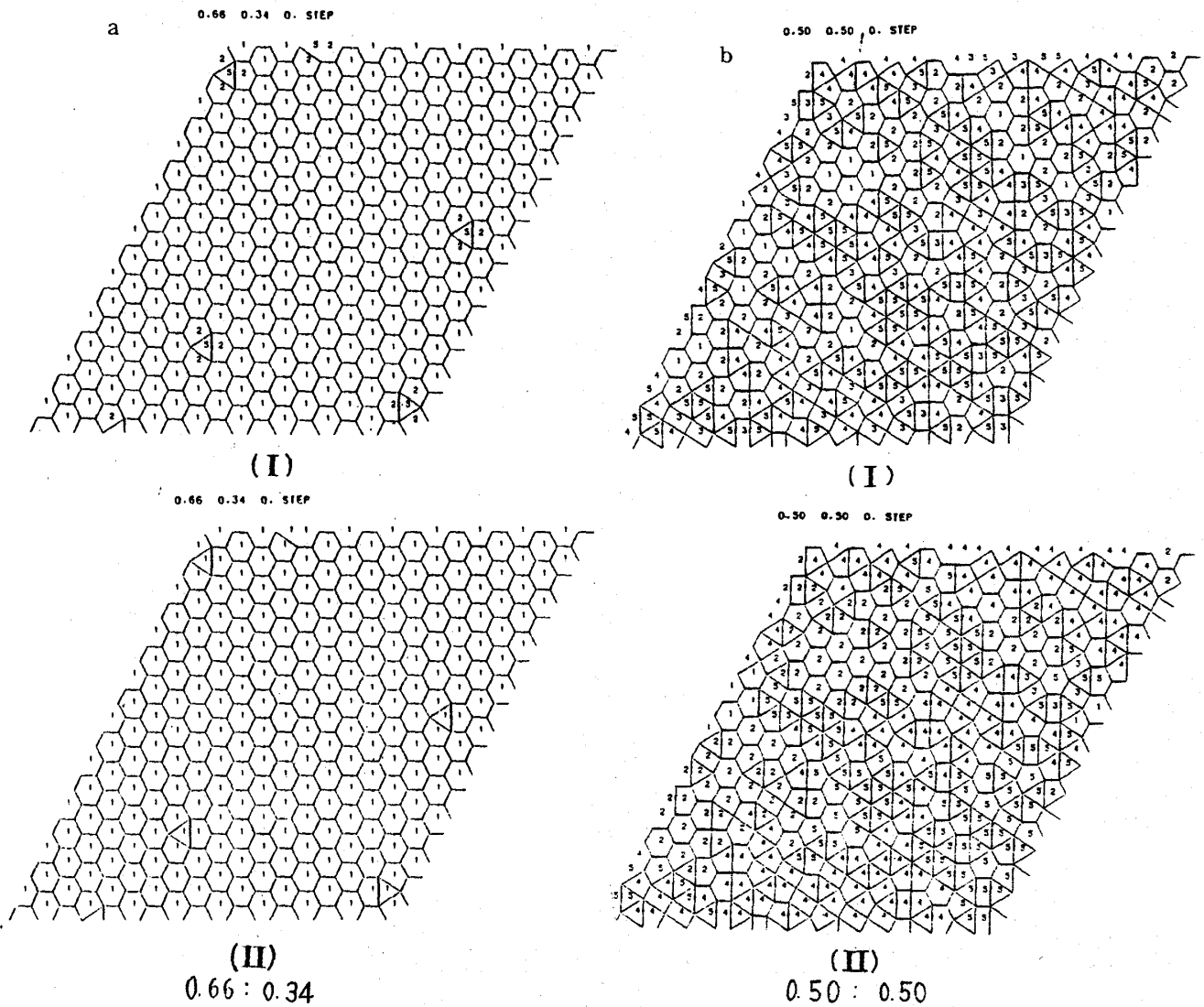


図 4-4 くり込み初期状態と 20 回くりこんだ後の色の分布  
 (I) は初期状態 (II) はくり込み後



する。

一方の状態のポロノイ多角形の面積は、その中の格子点が占有している領域の広さである。したがって局所的な濃度をポロノイ多角形に定めることができる。

ポロノイ多角形および辺上にあるスピンの個数で、多角形内の濃度を定める。この際、多角形の辺上のスピンは、その格子点を多角形内からみた二辺の角度の大きさに比例した個数の寄与を与える。すなわち、

$$\left( \begin{array}{l} \text{多角形上のスピン} \\ \text{の個数の寄与} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{l} \text{格子点を通る2辺} \\ \text{のなす角度 } \theta [\text{rad}] \end{array} \right) / 2\pi [\text{rad}]$$

である。(ただし  $0 < \theta < \pi$ )

この方法により定められたポロノイ多角形の各濃度を図4-5に示す。

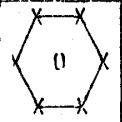
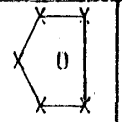
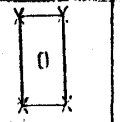
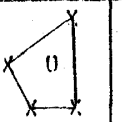
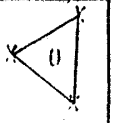
|   |                                                                                    |                                                                                    |                                                                                    |                                                                                    |                                                                                      |
|---|------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|
|   |  |  |  |  |  |
| 0 | 0.333                                                                              | 0.400                                                                              | 0.500                                                                              | 0.500                                                                              | 0.667                                                                                |
| X | 0.667                                                                              | 0.600                                                                              | 0.500                                                                              | 0.500                                                                              | 0.333                                                                                |

図4-5 局所濃度

局所濃度の空間内のゆらぎが、動きとどのような関係にあるかを調べたのが以下の図である。

図4-6は、局所濃度  $C_{10c}$  の空間内におけるゆらぎの時間平均(動きによる平均)

$$E_{t,500}(V_r(C_{10c}))$$

である。また、図4-7は、局所濃度  $C_{10c}$  の空間内におけるゆらぎの時間によるゆらぎ(動きによるゆらぎ)

$$V_{t,500}(V_r(C_{10c}))$$

である。 $V_{t,500}(V_r(C_{10c}))$  は、0.56 ~ 0.57 付近で異常的な振舞いをする。

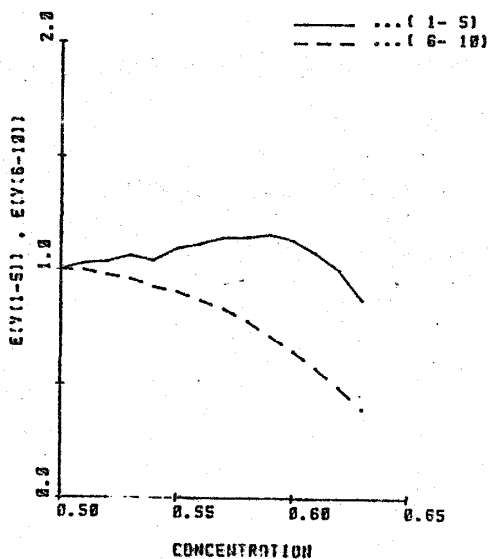


図4-6 局所濃度の空間ゆらぎの時間平均  
 $E_{t,s}(V_r(C_{10c}))$ ,  $S = 500$   
 (実線は少数派スピンの局所濃度,  
 破線は多数派スピンの局所濃度)

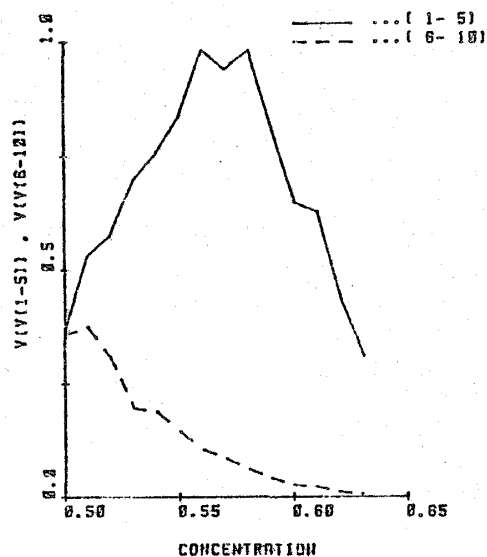


図4-7 局所濃度の空間ゆらぎの時間ゆらぎ  
 $V_{t,s}(V_r(C_{10c}))$ ,  $S = 500$   
 (実線は少数派スピンの局所濃度,  
 破線は多数派スピンの局所濃度)

## 第5章 局所構造の特性

本章では、非隣接スピン対相関のある局所構造を導出し、グラフのトポジカルなつながりに帰着させる。

### 5-1節 非隣接スピン対相関のある構造

運動法則で状態交換する2つの格子点のうち少なくとも1つの格子点と最隣接距離に8個の格子点は、状態交換の前後で、その点を中心にした基本要素が変化する。そこで、状態交換するスピン対と非隣接スピン対相関するもう一方のスピン対は、2つの格子点のうち少なくとも一点が、8個の格子点のある1点でなければならない。

この条件を満たすスピン対は合計30組存在する。(図5-1) そこで、すべての組につ

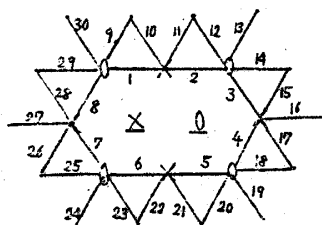


図5-1 非隣接スピン対相関の及ぶ範囲(1~30)

いて、はじめのスピンの状態交換で、交換可能となる場合があるかを調べた。その結果、図5-2に示した5組の局所配位が、非隣接スピン対相関がある構造である。

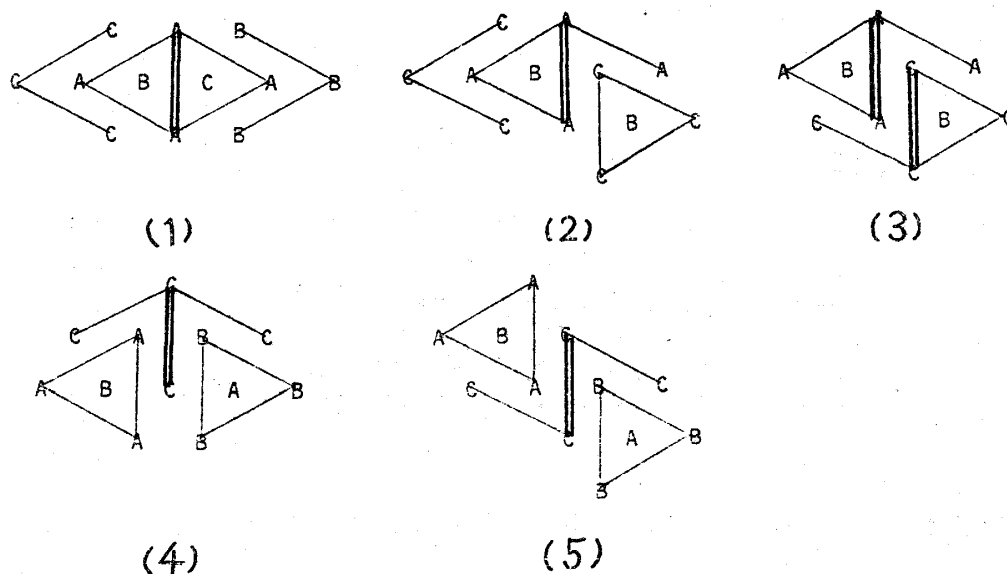



図5-2 非隣接スピン対相関のある5つの局所配置  
(二重線は共通線を示す。)

この5種類の等高グラフの共通点は、交換可能である条件を、異なる二組のスピン対が共有していることである。(共通線) 異なる二組の非隣接対に動きとしての相関があるときには必ずこの共通線が存在することになる。

### 5-2節 尾根線と谷線<sup>7)</sup>

等高グラフが、等高線に見立てられることを用いて、非隣接スピン対相関のある局所配位を地形的に見立てる。

#### (1) 尾根線、谷線の導入

状態交換する $\sqrt{3}$ 正三角形の重心と頂点において、頂点に対して重心と反対側に位置する格子点をグラフで結ぶ。このとき、 $\sqrt{3}$ 正三角形の重心から頂点への向きが、副格子の正の順序にあるとき、結んだグラフを尾根線(Ridge Line)、負の順序にあるとき谷線(Antiridge Line)と呼び、それぞれ……、で表わす。尾根線と谷線はともに、相補的な関係である。

運動法則は、尾根線・谷線で以下のようにいうことができる。(図5-3)

「 $\sqrt{3}$ 正三角形の重心と頂点を結ぶ方向の尾根線(または谷線)が、この頂点と交わっているとき、この頂点と重心の状態交換が可能である。」

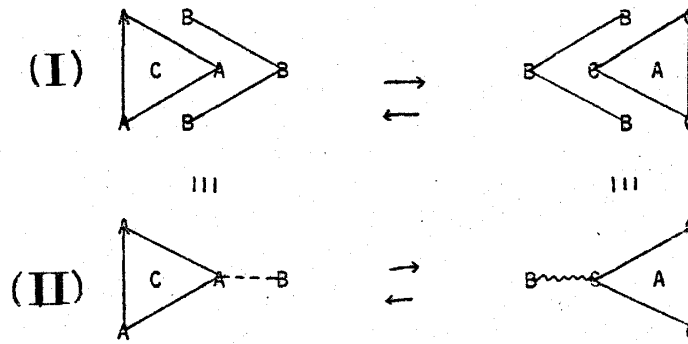


図5-3 運動法則と尾根線・谷線

(I)は等高グラフ表示。  
 (II)は尾根線・谷線を用いた表示。  
 (破線は尾根線，波線は谷線を示す。)

状態交換の前後では，尾根線は谷線に，谷線は尾根線に変化する。

(2) 非隣接スピン対相関と尾根線、谷線

非隣接スピン対相関のある局所配位は， $\sqrt{3}$  正三角形，共通線，尾根線，谷線で表わせる。

(図5-4) ここで，尾根線と谷線がそれぞれ一本ずつあることに注意する。

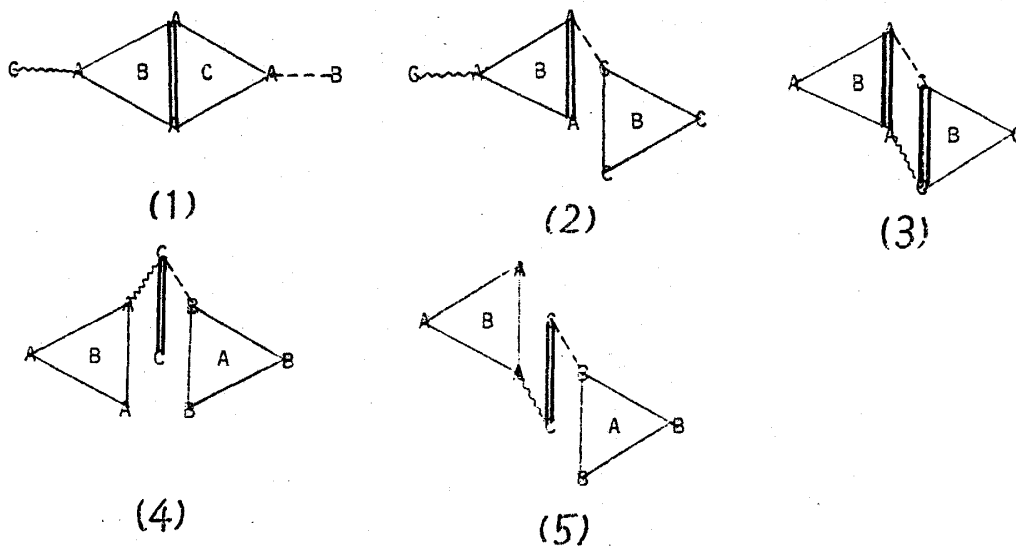


図5-4 非隣接スピン対相関のある5つの局所配位の尾根線・谷線による表示

尾根線，谷線を用いたグラフは，以下のように統一的に非隣接スピン対相関の意味を与えることができる。

(1) グラフで書かれた配位は，現在である。

(2) 谷線（または尾根線）は，過去から現在への動きに対応する。

(3) 尾根線（または谷線）は、現在から未来への動きに対応する。

すなわち、2つの $\sqrt{3}$ 正三角形の過去→現在→未来という二段階の動きのつながりがつけられる。

図5-5に、系全体の非隣接スピン対相関によるつながりを示した。

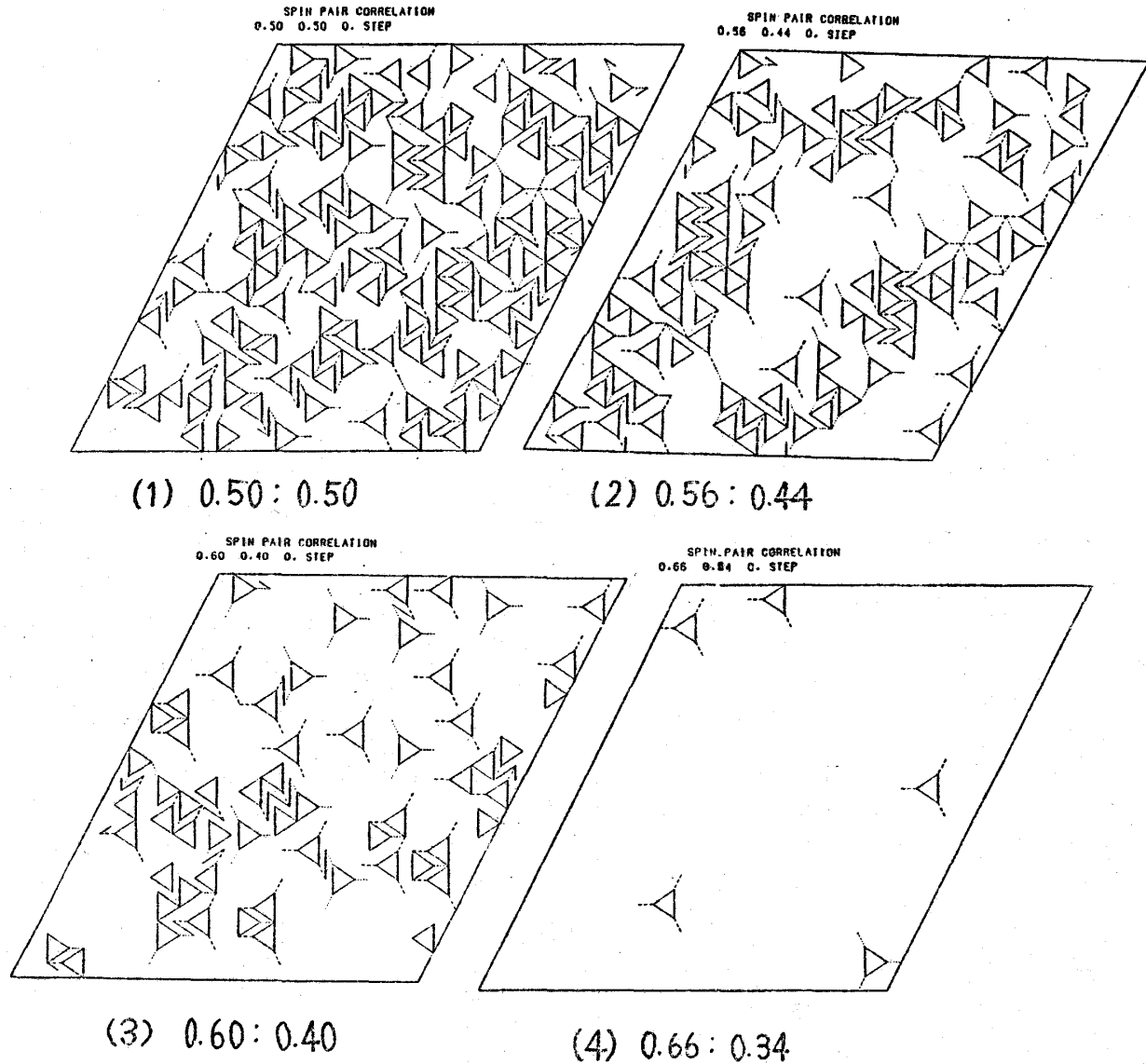


図5-5 尾根線，谷線， $\sqrt{3}$ 正三角形，共通線による系全体の非隣接スピン対相関の表示

### (3) 拡張グラフ

系全体の非隣接スピン対相関によるつながりを，以下の変換で尾根線・谷線だけのグラフ（拡張グラフ）で表現する。

「グラフの $\sqrt{3}$ 正三角形と共通線，または， $\sqrt{3}$ 正三角形と尾根線・谷線の位置関係を保存

しながら、 $\sqrt{3}$  正三角形と共通線をそれぞれの重心方向に限りなく縮小させる。すなわち

$$(\text{拡張グラフ}) = \lim (\text{グラフ})$$

$$\begin{matrix} \Delta \rightarrow \cdot \\ \Rightarrow \cdot \end{matrix}$$

( $\Delta$  と  $\sim$ , ... の位置関係不変)  
( $\Delta$  と  $=$ )

である。」

この際、位置関係の不変性から、極限として縮小した部分が一致することがある。

図5-6は、非隣接スピン対相関のあるグラフの拡張グラフである。このようにグラフを拡張すると、非隣接スピン対相関のある構造をグラフのトポジカルなつながりに帰着させることができる。

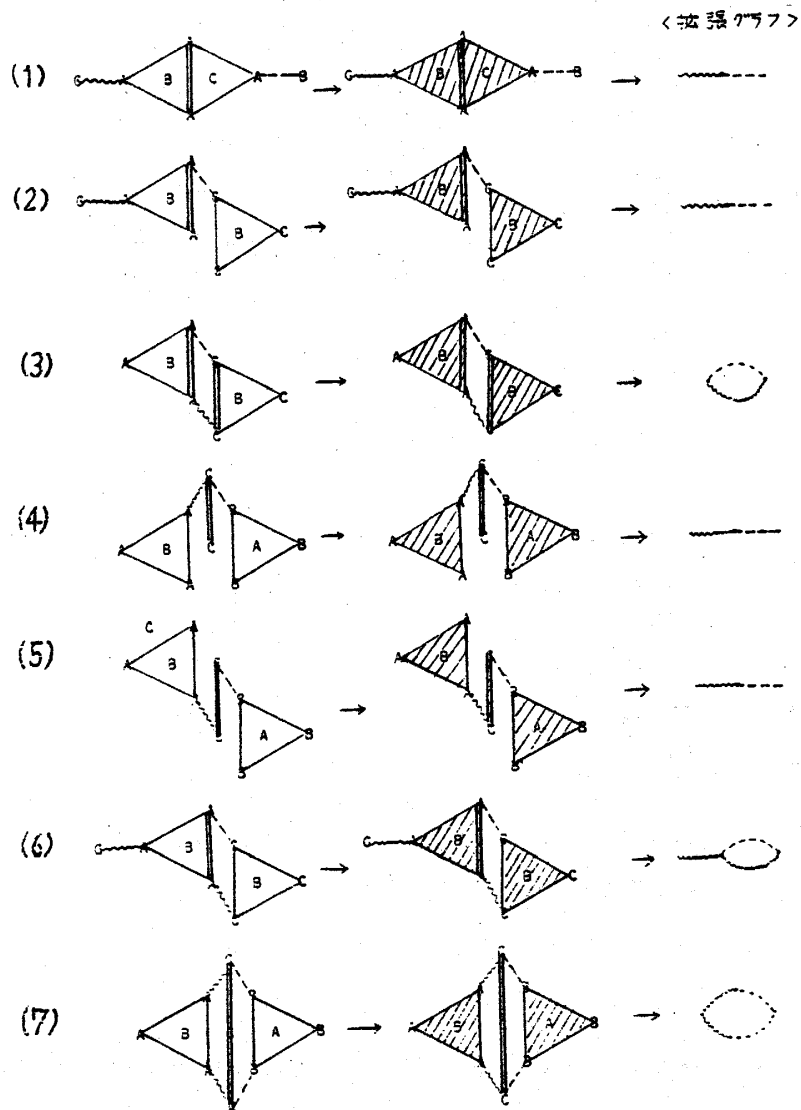


図5-6 拡張グラフによる非隣接スピン対相関の表現

## 第6章 考 察

- 1) 等高グラフの導入により系の静的性質および動的性質の理解が容易になった。
- 2) Monte Carlo 法により, 多数派スピンの比率が, 0.54 ~ 0.58 付近に折れ曲がりが見られた。
  - (i) 格子点あたりの動きの頻度によるモーメントが 0.56 ~ 0.57 付近で折れ曲がった。また同時に動きのムラの様子に変化した。
  - (ii) 副格子対間の状態交換数の濃度変化が 0.54 付近で急激に変化した。
  - (iii) 副格子対間の状態交換数の時間経過に対するゆらぎが 0.54 ~ 0.56 付近で異常な振舞いをした。
  - (iv) 少数派スピンの局所濃度における空間ゆらぎの時間ゆらぎが 0.56 ~ 0.57 付近で異常的な振舞いをした。
- 3) 尾根線・谷線で非隣接スピン対相関のある局所構造を表現すると, 系の空間的, 時間的理  
解が容易になった。またグラフを拡張すると, 系の空間的, 時間的つながりをグラフのトポ  
ロジカルなつながりに帰着させることができる。

本論文ではグラフによる方法を中心にアンサンブルの性質を調べてきたが, 系の多様さは予想をはるかに上回るものであり, 今後さらに詳細な検討が必要である。

## 謝 辞

二年間常に心暖まる御指導をいただいた筑波大学物理工学系 小川泰助教授に感謝します。  
貴重な御意見をいただいた筑波大学物理工学系 石原武教授, 東京電機大学応用理化学科 篠原正三教授に感謝します。

有益な助言をいただいた統計数理研究所 種村正美博士に感謝します。

最後に, 公私ともども御世話になった筑波大学物理工学系理論研究室のみなさまに感謝します。

中島幸久

References

- 1) G. H. Wannier ; Phys. Rev. **79** (1957) 357 and Phys. Rev. **B 7** (1973) 5017.
- 2) R. Kikuchi ; Phys. Rev. **81** (1951) 988.
- 3) S. J. Hijmans and J de Boer ; Physica **21** 471, 485, 499 (1955).
- 4) T. Ogawa ; J. Phys. Soc. Jpn. **52** Suppl. (1983) 167.  
T. Ogawa ; In *Topological Disorder in Condensed Matter*, Ed. by F. Yonezawa  
and T. Ninomiya (Springer 1983) 60.
- 小川 泰 ; 数理科学 246 (1983) 7.
- 5) 小川 泰, 中島幸久 ; 物性研究 42 卷 1 号 卷末研究会報告 (1984) 30.
- 6) 中島幸久, 小川 泰 ; 物性研究掲載予定  
小川 泰, 中島幸久 ; 統計数理研究所彙報掲載予定。
- 7) T. Ogawa and Y. Nakajima ; in preparation.