

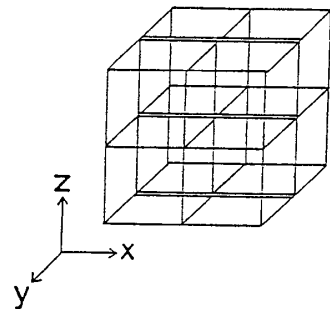
くある値より小さいときに reentrant 転移が現れる。

この結果は K. G. Chakraborty and T. Morita, Phys. Lett. **105A** (1984) 429; Physica **129A** (1985) 415 に掲載されている。

### 3次元フラストレーション・イジング 格子のシミュレーション

東工大・理 小野昱郎, 小口武彦

周期的にフラストレートした単純立方格子上的イジング模型の相転移をモンテカルロ・シミュレーションで調べた。新しい秩序変数として wrong ボンドの秩序を導入し、そのゆらぎのサイズ依存性から、中間温度で相関関数が距離のべきに比例する相が3次元でも現われることがわかった。



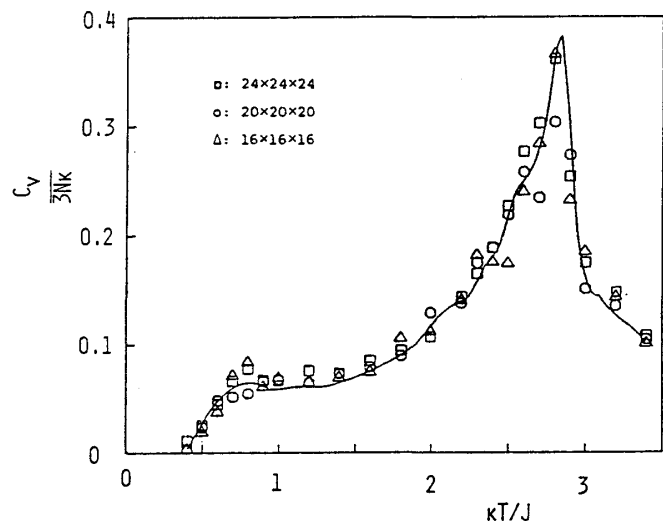
第1図 フラストレート単純立方格子。実線は強磁性、二重実線は反強磁性ボンドを表わしている。

第1図に示されているように、単純立方格子の一面置き  $xz$  面内で、 $x$  方向の鎖の強磁性ボンド( $J$ )を反強磁性ボンド( $-J$ )ですべて置換したイジング格子を扱う。 $xy$  面内のプラケットは全てフラストレートしている。シミュレーション

は格子のサイズ  $8 \times 8 \times 8$ ,  $12 \times 12 \times 12$ ,  $16 \times 16 \times 16$ ,  $20 \times 20 \times 20$ ,  $24 \times 24 \times 24$  について、周期境界条件を用いて、600-1800 MC S/spin にわたる平均をとった。

エネルギーのゆらぎから求めた比熱の温度変化を第2図に示す。同時に各温度で得たエネルギーを数値微分して比熱を求め、実線で示した。

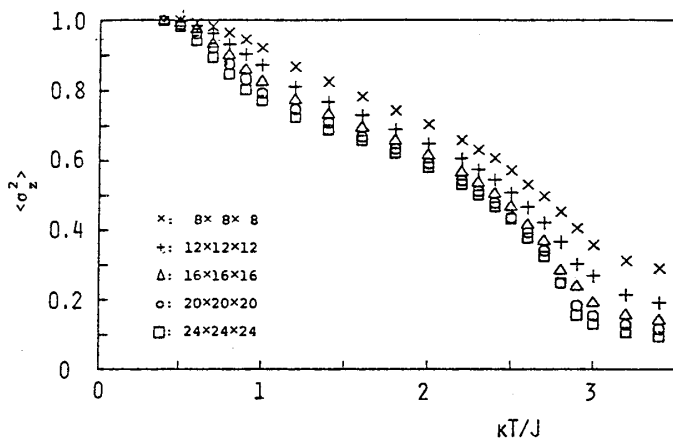
比熱は  $kT/J \approx 2.8$  付近で鋭いピー



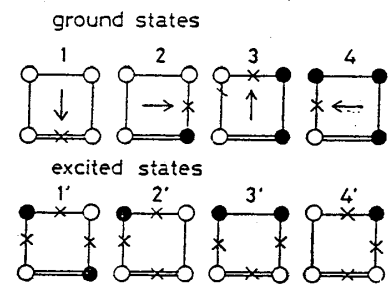
第2図 エネルギーのゆらぎにより計算した比熱 ( $\Delta$ ,  $\circ$ ,  $\square$ ) とエネルギーを温度で数値微分して求めた比熱 (実線)

クがあり、すそが低温側にのびている。 $kT/J \approx 1.0$  付近の肩はもう一つの山が隠されていると思われる。永井等<sup>1)</sup>の結果とほぼ一致している。立方体を用いたクラスター近似<sup>2)</sup>では  $kT_c/J \approx 3.17$  で2次転移であったが、サイズの増大にともなうピークの先鋭化はあまりはつきりしない。

この比熱のピークは低温側での秩序相の存在を示唆しているが、通常の副格子構造の秩序ではない。 $z$ 方向に沿った鎖内のスピンは低温になるにつれ、第3図で示されるように、ほぼ平行に揃うことがわかった。一方、鎖間の配列は  $xy$  面がすべてフラストレートしていることにより複雑に変動する。



第3図  $z$ 方向の鎖上の磁化のゆらぎの温度変化



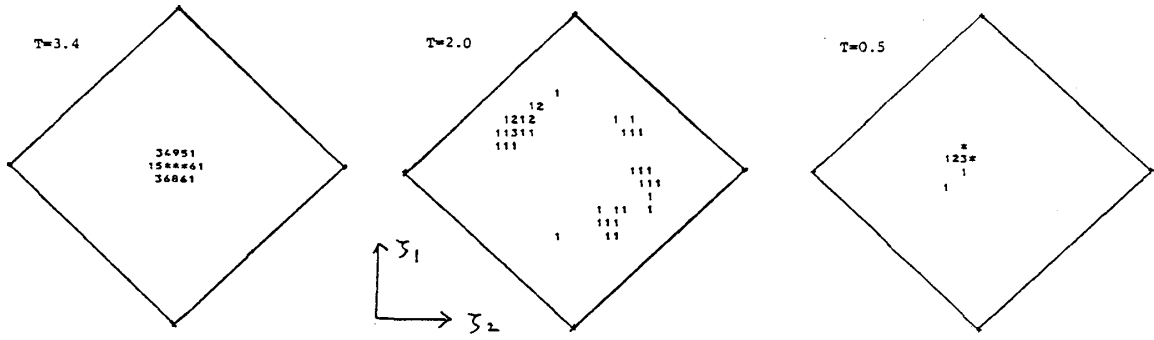
第4図 正方形セル・スピン配列。  
○, ●はそれぞれ、上向き、下向きスピン、xは wrong ボンドを表わす。

$xy$  面内の1つの正方形のセルに注目すると、基底状態のスピン配列は第4図に示されているように4重(全スピンの反転を含めれば8重)に縮退している。また、励起状態も同じ4重縮退である。スピンの配列ではなく、wrong ボンドの配列に直接関係した新しい秩序変数として  $\zeta_{\downarrow}$ ,  $\zeta_{\rightarrow}$ ,  $\zeta_{\uparrow}$ ,  $\zeta_{\leftarrow}$  を次の式で導入する。

$$\left. \begin{aligned} \zeta_{\downarrow} &= p(1) - p(1') \\ \zeta_{\rightarrow} &= p(2) - p(2') \\ \zeta_{\leftarrow} &= p(3) - p(3') \\ \zeta_{\uparrow} &= p(4) - p(4') \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

ここで、 $p(\alpha)$  は  $\alpha$  番目のセル・スピン構造をとる確率を表わす。ここではセルの全スピンを反転したスピン構造も同じ値をとる。この秩序変数を組合せた

$$\left. \begin{aligned} \zeta_1 &= \zeta_{\downarrow} - \zeta_{\uparrow} \\ \zeta_2 &= \zeta_{\rightarrow} - \zeta_{\leftarrow} \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

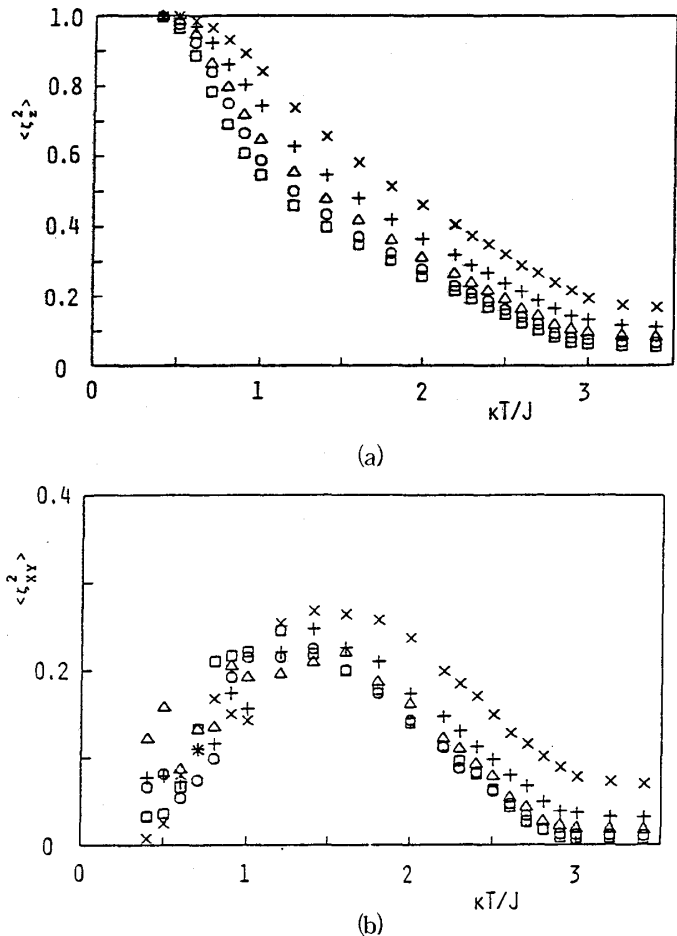


第5図 各ステップでの wrong ボンド秩序変数の値の分布。8 × 8 × 8 格子で 600 - 1800 ステップでの出現数を 10 で割り切り捨てた値。例えば 3 は出現数 30 - 49 回を表わしている。\* は 100 回以上を表わす。

は(1)式の 4 つの秩序変数を正方形の合同群 ( $C_{4v}$ ) の表現の基底にとったとき 2 次元 E 表現の既約基底になっており、分極と同じ対称性をもっている。para 相では wrong ボンドの位置も等方的であり、 $\zeta_{\downarrow} = \zeta_{\uparrow} = \zeta_{\rightarrow} = \zeta_{\leftarrow}$  になっているので、 $\zeta_1 = \zeta_2 = 0$  となる。第5図に各ステップでの秩序変数の値の分布が示されている。 $kT/J \gtrsim 2.8$  では  $\zeta_1 = \zeta_2 = 0$  の中心付近に分布しているが、温度が下がるにつれ中心のまわりにリング状の分布となり、ゆらぎが大きいことを示す。さらに低温では逆に有限な値のまわりに分布が集中していくように見える。

$$\text{ゆらぎの大きさ} \langle \zeta_1^2 + \zeta_2^2 \rangle$$

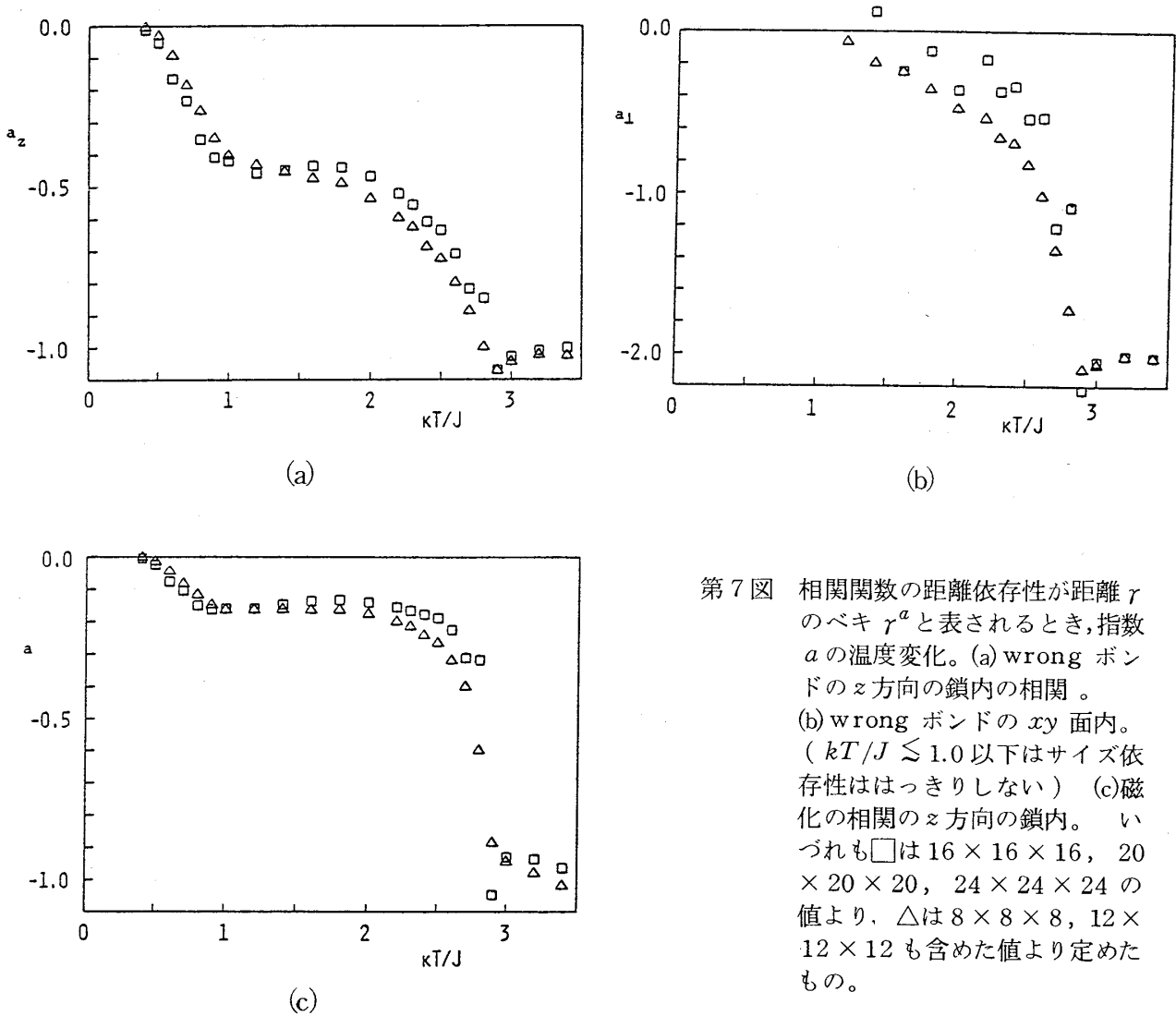
は z 方向と xy 面内とでは温度変化が異なることが第6図に示されている。z 方向は低温になるにつれ単調に増大していくが、xy 面内ではゆるい山があり、低温では秩序がまた失われるこ



第6図 wrong ボンド秩序変数のゆらぎの温度変化 (a) z 方向 (b) xy 面内 図中の記号は第3図と同じ。

とがわかる。

秩序変数のゆらぎのサイズ依存性は、それに対応した相関関数の距離依存性と密接な関係がある。相関関数が距離  $r$  のべき  $r^a$  に比例するとすれば  $z$  方向では  $\langle \zeta^2 \rangle_z \sim \frac{1}{L_z} \int_0^{L_z} z^{a_z} dz \sim L_z^{a_z}$ , ここで  $L_z$  は格子の  $z$  方向のサイズである。また  $xy$  面内で  $\langle \zeta^2 \rangle_{xy} \sim \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} (x^2 + y^2)^{a_{\perp}/2} dx dy \sim (L_x L_y)^{a_{\perp}/2} \sim L_x^{a_{\perp}}$  ここで,  $x, y$  方向のサイズ  $L_x, L_y$  は  $L_x = L_y$  とした。したがって, ゆらぎの対数とサイズの対数の関係は線形になり, その勾配を最小2乗法で決定した  $a_z$  と  $a_{\perp}$  の値を第7図に示した。para 相ではもしサイズ  $L$  が相関距離  $\xi$



より大きいときは, 積分の値はサイズに依存せず,  $a_z = -1, a_{\perp} = -2$  となる。また, 長距離秩序相では  $a_{\perp} = a_z = 0$  となるはずである。中間温度では  $0 > a_z > -1, 0 > a_{\perp} > -2$  の相があることがわかる。

シミュレーションの結果の解析により, この相転移は以下の4つの領域にわけられる。

$kT/J \gtrsim 2.8$  では para 相,  $2.8 \gtrsim kT/J \gtrsim 1.0$  では相関関数の距離依存性が  $r$  のべきで表わされる K-T (Kosterlitz-Thouless) 相的であり,  $a_z$  は 0.5 程度である。一方  $a_{\perp}$  はかなり温度依存性がある。 $kT/J \lesssim 0.4$  では  $z$  方向にのびた鎖内ではほぼ完全な秩序 ( $a_z = 0$ ),  $xy$  面内では秩序がない。 $1.0 > kT/J > 0.4$  は遷移領域と思われる。この格子が  $xy$  面のみの 2 次元のときは odd 模型であり, Villain<sup>3)</sup> によって絶対 0 度まで秩序相がないことが厳密に示されている。ここでの K-T 的な相の出現は  $z$  方向の相互作用によるもので, この相互作用の大きさの影響を調べる必要がある。

### 参考文献

- 1) O. Nagai, Y. Yamada and H. T. Diep: Phys. Rev. **B32** (1985) 480.
- 2) T. Oguchi: J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 3101.
- 3) J. Villain: J. Phys. **C10** (1977) 1717.

## フラストレーション系の不純物効果

東北大・工 松原史卓

近年, 種々のフラストレーション系のスピン構造の問題が盛んに研究されてきている。これらの系の特徴は縮退した多くのスピン構造が存在し, それらの間のエネルギー障壁が大変小さいことである。これらがフラストレーション系の特徴的なふるまいの原因となっている。

これらの系では不純物は普通の強磁性系とは大変異なった働きをすることが期待される。なぜなら, 不純物はその周囲のスピン構造の縮退を解くからである。この縮退の解き方は一般に不純物の空間的な位置によって異なる。又, 不純物の分布には確率論的な偏りが生じることがさげられない。以上のことは, フラストレーション系では, 不純物が系の均一なスピン構造を破壊する働きをすることを意味している。

我々はフラストレーション系の不純物効果についての定性的な議論を行い, この系では不純物が強磁性系におけるランダム磁場 (ランダム磁場系) と類似の働きをすることを明らかにした。又, この系ではランダム磁場系にはない特性が見られる可能性があることを指摘した。これらを確認するために三角格子反強磁性イジングモデル (強磁性的第二最近接相互作用を持つ) のモンテカルロシミュレーションを行った。議論から推測され, シミュレーションによって確