

33. 相転移と秩序相に対する界面的研究とその高縮退系への応用

上野陽太郎 (東工大理工)

§ 1. はじめに。

縮退度の高い系の相転移現象は現在多くの興味を集めているが、3次元では、理論的解析は勿論のこと、モンテカルロシミュレーション (MCS) による研究でもハッキリしたことはまだ分かっていない。その典型は3次元3角格子反強磁性体 (AF) モデルである。この系はフラストレーション (FR) があるために、基底状態に (あるいは、フェロの弱い次近接相互作用が加えてあれば、励起スペクトルに) 高度の縮退をもつ。同じような高縮退の系としてはAFポッツモデルがある。スピングラス (SG) の系はランダム性のために更に困難である。これらの系の特徴はゆらぎが極度に強いことである。界面の方法によって秩序相の磁氣的剛性度を調べると、自明の縮退しかない通常の系に比べて、それがかなり小さくなっていることからわかる。界面の性質を通してバルクの相転移と秩序状態を調べるこの方法は、通常の系のみならず高縮退系の揺らぎの強い系に対しても非常に強力であることが判明した。ポッツモデルを主として、次の順序で話す。

§ 2、界面の方法。 § 3、そのテスト。 § 4、3d AFポッツモデル ($q=3\sim 6$)。

§ 5、3d 3角AF Isingモデルと $\pm J$ ランダムIsingモデル。 § 6、まとめ。

§ 2. 界面による研究方法。

図1は強磁性体の不利な境界条件における界面のできた状態を示す。界面の自由エネルギーは有利な境界条件に対する余分の自由エネルギーに等しくなる $1/l$ 。即ち、 $L \rightarrow \infty$ に対して、

$$\Delta F \equiv F_{uf} - F_f = \Delta E - T\Delta S \sim L^a(T) \quad (1)$$

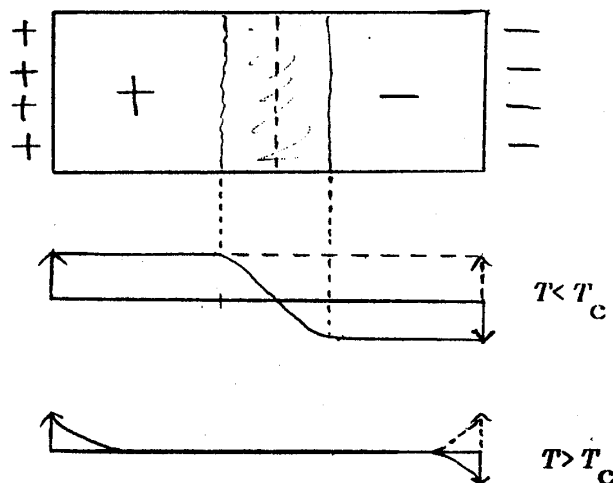


図1

$a(T)$ は秩序状態の剛性度を表す剛性指数であり、次の性質を持つ。

$$a(T) \begin{cases} < 0 & T > T_c \\ = 0 & T = T_c \\ > 0 & T < T_c \end{cases} \quad (2)$$

これは低温では一定になる ($a = a_0$)。通常の系では、 $a_0 = d-1$ (不連続スピン)、 $d-2$ (連続スピン) であるが、ここで考える系は非整数値になることが判明した。

(1) と (2) から、 $T = T_0$ ($> T_c$) では $\Delta S_0 = \Delta E_0 / T_0$ 。したがって、 $T < T_0$ での ΔS は、MCS から得た ΔE を使って計算できる。

$$\Delta S = \Delta S_0 - \int_T^{T_0} \frac{1}{T'} \left(\frac{d}{dT'} \Delta E \right) dT' \quad (3)$$

T_0 は T_c 近くに設定できるので、この積分計算は非常にいい精度でもとまり、有限サイズスケーリング等の解析が初めて可能になった。

$$\Delta F = f(tL^{1/\nu}), \quad t = (T - T_c) / T_c \quad (4)$$

$$f(x) \sim x^{a_0 \nu} \quad |x| \gg 1 \quad (t < 0) \quad (5)$$

$T > T_c$ では ΔF の精度が悪いので使わない。 $a = 0$ から T_c を求め、スケーリング ($\log - \log$) プロットにより ν を決める。 a_0 の精度がよければ、(5) を利用して、直線部の勾配から ν を求め、先に得た値と比較してチェックができる。更に秩序変数の自乗を計算して、

$$M_2(t) = \langle M^2 \rangle = L^{-2\beta/\nu} m(tL^{1/\nu}) \quad (6)$$

$$m(x) \sim \begin{cases} x^{2\beta} & |x| \gg 1 \quad (t < 0) \\ x^{-\gamma} & |x| \gg 1 \quad (t > 0) \end{cases} \quad (7)$$

先に得た T_c と ν を使い β と γ を次々に決める。なお、 γ は直線部だけからの評価だから精度は劣る。最後に $d\nu = 2\beta + \gamma$ によるチェックができる。

§ 3. 界面の方法のテスト

1) 3d フェロIsingモデル (立方格子、 $L=8, 12, 16, 20, 5 \sim 7 \cdot 10^3$ MCS) 得られた結果:
 $a_0 = 2.0$ 、 $T_c = 4.54$ 。臨界指数の値は表 I に示す。精度の割には信頼できる結果を得ている。

| ν | β | γ | |
|--------------------|--------------------|--------------------|-----------|
| 0.62 ± 0.01 | 0.32 ± 0.02 | 1.17 ± 0.02 | this work |
| 0.630 ± 0.0015 | 0.325 ± 0.0015 | 1.241 ± 0.0020 | /2/ |

2) 2d3角格子AF Isingモデル

$L=30, 45, 60, 75; 5 \sim 7 \cdot 10^3$ MCS。 $J_2 / |J_1| = 0.15$ の場合、 $T_{KT}=1.31$, $T_c=0.66$ に相転移が生じる(図2)。中間相はKosterlitz-Thouless相の特徴($\xi = \infty$)であることを示す $a=0$ となっている。8状態クロックモデルでも同様の結果を得ている。

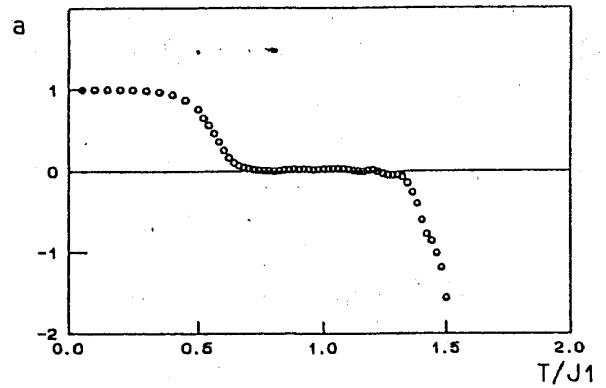


図2

§4. 3d AFポッツモデル(立方格子)

$q = 3, 4, 6$ は $5 \sim 7 \cdot 10^3$ MCS、 $q = 5$ では $2 \sim 4 \cdot 10^4$ MCS。サイズは $q = 3$ と 4 の臨界点領域では $L=12, 18, 24$ として5サンプル。それ以外はすべて $L=6, 12, 18, 24$ (あるいは $L=8, 12, 16, 20$) で1サンプル。

目的と問題点

- i) エントロピー利得転移の確認とその臨界的性質を明らかにすること。
- ii) q 状態 AFポッツモデルは $n (=q-1)$ 成分等方スピンモデルに等価(Banavar et al/3/)。
- iii) $q = 3$ モデルはKT的転移(Ono /4/)。
- iv) $q = 5$ モデルは相転移を示さない(Banavar et al /3/)。

秩序相の配列は、 $q = 3$ では、A部分格子にスピン状態1、Bには状態2と3が半々に存在する、即ち、(1, 2/3)。 $q = 4$ では(1/2, 3/4)。 $q = 5$ では(1/2, 3/4/5)。不利な境界条件では、例えば、 $q = 3$ では(2/3, 1)とする。

結果の要約

- 1) $q = 3 \sim 5$ には相転移があるが、 $q = 6$ にはない。剛性指数はすべて非整数。
 $T_c(\times)$ と $a_0(o)$ は(図3)。

- 2) すべてはエントロピー利得転移。

図4 ($q=3$) と図5 (フェロIsing) を比べると、低温における $\Delta F > 0$ の源は、前者ではエントロピー利得 ($\Delta E \approx 0, \Delta S < 0$)、後者ではエネルギー利得 ($\Delta E > 0, \Delta S \approx 0$)、を示している。 ΔS 等の曲線全体が両者で際だった対照を示し、非常に興味深い。

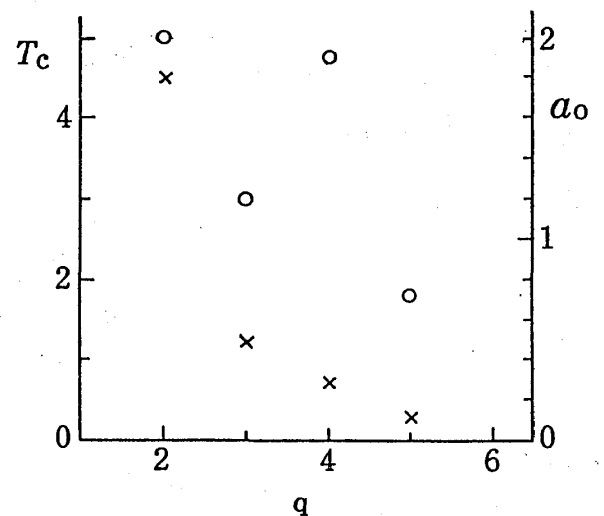


図3

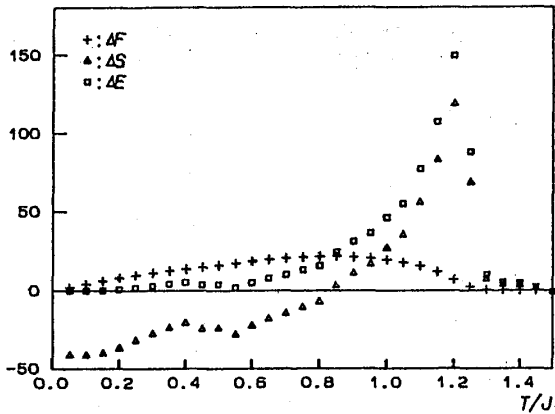


図 4

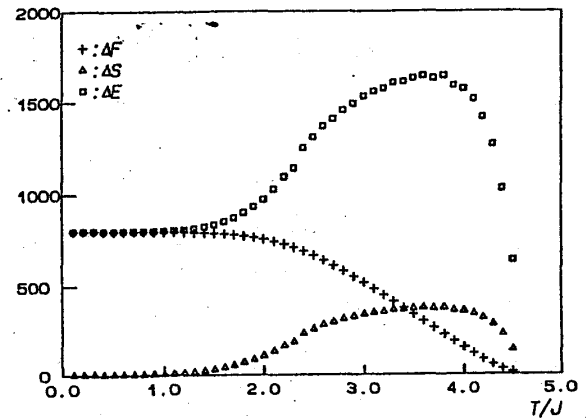


図 5

3) 臨界的性質。q = 3 と 4 は指数の値と a_0 の値から新しい universality class と考えられる (表 II)。これらの結果は明かに $n (=q-1)$ vector モデルの等価性と q = 3 の K T 的相の存在を否定する。

| | ν | β | γ | α | |
|-----|-----------------|-----------------|-----------------|----------|-----------|
| q=3 | 0.58 ± 0.01 | 0.34 ± 0.02 | 1.10 ± 0.02 | (0.15) | this work |
| q=4 | 0.65 ± 0.02 | 0.39 ± 0.02 | 1.17 ± 0.02 | (0.15) | |
| n=2 | 0.669 | 0.3455 | 1.316 | -0.007 | /2/ |
| n=3 | 0.705 | 0.3645 | 1.386 | -0.115 | |

§ 5. 3 d 3 角 A F Ising モデル と $\pm J$ ランダム Ising モデル

A. 3 d 3 角 A F Ising モデル

面内の相互作用は最近接が $J_1 (<0)$ 、次近接は $J_2 (>0)$ 、面間は最近接のみの $J_0 (>0)$ 。ここでは $J_2 / |J_1| = 0.1$ 、 $J_0 / |J_1| = 1.0$ とする。 $L=12, 15, 18, 21, 24$; 1.5×10^4 MCS。基底状態はフェリであるが、中間相の性質を明らかにするために、フェロ (F) 成分と A F 成分に分けて考える。A, B, C 部分格子の磁化を $\sigma_A, \sigma_B, \sigma_C$ とすれば、前者は $f = (\sigma_A + \sigma_B + \sigma_C) / \sqrt{3}$ 、後者は 2 成分からなり、 $c = (2\sigma_A - \sigma_B - \sigma_C) / \sqrt{6}$ と $s = (\sigma_B - \sigma_C) / \sqrt{2}$ 。境界条件は A F の s 成分そして F 成分に対するものを設定。得られた $a(T)$ は図 6 (A F の s 成分: \times 、F 成分: o)。

1) 3つの転移の存在

(i) AF成分に関する転移 ($T_{AF1}=3.7, T_{AF2}=2.1$)。

剛性指数は中間相で $a \approx 1.2$ 、低温相で $a = 2.0$ 。

(ii) F成分に関する転移 ($T_F=2.9$)。 $a_0=2.0$ 。

したがって、秩序状態は $T_{AF2} < T < T_{AF1}$ では AF成分の軟らかい秩序 (連続スピンの)。

$T < T_F$ では F成分の堅い秩序 (Isingスピンの)。

$T < T_{AF2}$ ではフェリ的な堅い秩序。

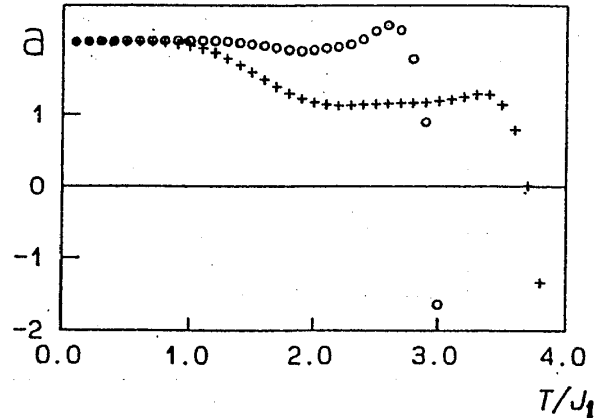


図6

2) 転移の特徴

(i) AF 1の転移は XY universality classではない ($a \approx 1.2 > 1.0$, 比熱の発散)。

(ii) Fの転移はフェロの Ising の転移ように見える。

(iii) AF 2の転移は新しい型の転移と考えられる。理由は、剛性が質的に変化すること、対称性の変化を伴わない。

AF成分の剛性指数の温度依存性は6状態クロックモデルと酷似しており、後者の研究からこれは界面の性質に深く関係していることがわかってきた。AF 1の転移は前述の $q = 3$ ボツの転移とも似ている。Fの転移には比熱の発散がないので検討が必要

B. $\pm J$ ランダム Ising モデル

転送行列を使い、フェロ的境界条件に対し ΔF の計算を行った。 $L=6, 8, 10, 12$ (2d); $3, 4$ (3d)。サンプル数は 2000 (2d), 4000 (3d)。 ΔF は分布を持つので、

$$\langle \Delta F \rangle \sim L^a(T), \quad \langle \Delta F^2 \rangle - \langle \Delta F \rangle^2 \sim L^{2\tilde{a}}(T)$$

無秩序相は $a < 0, \tilde{a} < 0$ 。フェロ相は

$a > 0, \tilde{a} > 0$ 。SG相あるいはRAS (random antiphase state /3/)相は $a > 0, \tilde{a} = 0$ 。

図7は2dの $T=0.15$ における a (●) と \tilde{a} (×) の T 依存性である。RAS相が $0.86 < p < 0.89$ の間に存在することが示された。また、強磁性的相の境界は $p=0.89$

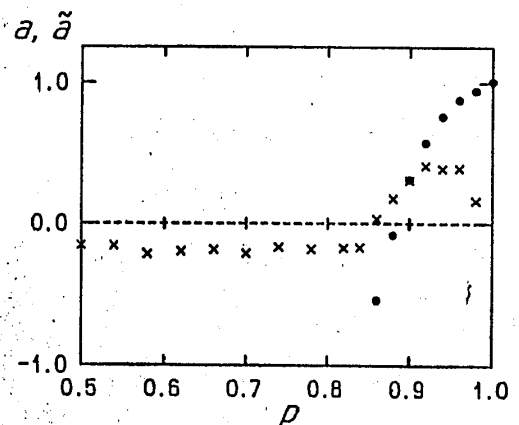


図7

を通る垂直線になることも確認された。3dではRAS相はありそうには見えない。低温でのSG領域では、濃度に依存せず $a = -0.15$ (2d), 0.1 (3d) であることが判明した。この

値は $p=0.5$ で得られたBray and Mooreの結果と大体一致する。

§ 6. まとめ

A 界面の方法の利点

- 1) 新しい量(剛性指数)によって、秩序相の剛性が分かる。それによって(有無を含めた)転移の区別が容易である。
- 2) 有限サイズスケーリングによって臨界指数が順番に一意的に決めることができる。
- 3) 境界条件を変えることによって、複雑な相転移の解析が容易である。
- 4) 界面のエントロピーによって、結合に働くエントロピーに役割が分かる。
- 5) 界面のプロファイルによって、秩序状態やそれらの間の関係が明らかになる。
- 6) ΔF 等の精密な計算によって、界面自身の研究に役立つと期待される。

B 高縮退系

- 1) 3d系では、ポッツも3角IsingもランダムIsingもゆらぎの強い秩序相が存在し、従来のとは異なった、新しい相が生じる。
- 2) 3d3角Isingでは、界面の性質(ラフニング転移ではない)に関係した新しい型の相転移と考えられる。
- 3) エントロピー利得による秩序であることが、ポッツモデルでは明かであるが、3角Isingの中間相ではその兆候があるがはっきりしたことは分からない。

C. 今後の問題

- 1) 剛性指数が非整数になる理由。界面の状態や秩序状態との関係。
- 2) エントロピーは3d3角Isingではどう効いているか。
- 3) 3d3角Isingでの新しい型の転移の詳細。AF1の転移の詳細。
- 4) $\pm J$ Isingモデルにおける混合相の問題。

この報告は以下の人々との共同研究の成果である。孫剛、小野 郎(§2~§4—J.Phys.Soc.Jpn.予定)、三坪喜久男、孫剛(§5の前半—YKISのproceeding、続編準備中)、尾関之康(§5の後半—尾関之康学位論文(東工大1988)、投稿準備中)。

/1/ D. Jasnow: Rep. Prog. Phys. 47 (1984) 1059.

/2/ J. C. Le Guillon and J. Zin-Justin: Phys. Rev. B21 (1980) 3476.

/3/ J. R. Banavar et al: Phys. Rev. B25 (1982) 4639.

/4/ I. Ono: Prog. Theor. Phys. Suppl. 87 (1986) 102.

/5/ R. Maynard and R. Rammal: J. Phys. (Paris) Lett. 43 (1982) L-347.