

不完全秩序相と界面的性質

東工大 上野陽太郎

ここで不完全秩序相（以下 IOP(Incompletely Ordered Phase) と略称）と呼ぶ相に相当するものは既に以前から見つけていたが、はっきりした性質は分かっていなかった。ここ数年間の界面的方法を使った種々のモデルに対する我々の研究の結果、多くのことが判明した。¹⁻⁴⁾ 特にこの相を特徴付ける物理量（剛性指数）の存在、新しいユニバーサルクラスを持つ相転移等である。更に最近他の分野でも IOP に類似の相がいくつか存在することが分かった。特に 1 次元量子スピン系での Haldane gap 相は IOP の 1 つと考えられ興味深い。

1. IOP とは？

3 次元 6 状態クロックモデル ($H = -\sum \cos(\theta_i - \theta_j)$, $\theta = \frac{1}{3}n\pi$ ($n = 0, \dots, 5$)) を例にとれば、中間相は XY 的な相ではなく、隣合った状態（例えば 0 と 1）が支配的な相 [0/1] である³⁾。この相の各スピン状態の分布は図 1 (a)（最後の頁）のようになり、状態 0 と 1 は混合している。この秩序はエントロピー利得による。隣合ったスピン状態のエネルギーを $\Delta\theta = 0$ を基準にして見れば、 $\Delta\theta = \pm\frac{1}{3}\pi, \pm\frac{2}{3}\pi, \pi$ のエネルギーは各々 $\epsilon_1 = \frac{1}{2}, \epsilon_2 = \frac{3}{2}, \epsilon_3 = 2$ となる。即ち、 ϵ_2 は ϵ_1 に対して 3 倍も高いので、 ϵ_1 はのりこえるが ϵ_2 はそうできない熱ゆらぎを持つ中間温度でこのような不完全な秩序の状態が実現できる。

2. モンテカルロ界面的方法¹⁾

IOP を調べるためには現在のところモンテカルロシミュレーション (MCS) に頼るしかない。しかし、従来の方法では秩序相の性質だけではなく、ゆらぎの強い系では臨界現象すら困難である。そのため MCS を使って界面の自由エネルギーを計算する方法が開発された。境界条件 $\alpha\beta$ と $\alpha\alpha$ を持つ 2 つの系の全自由エネルギー差として界面自由エネルギーは

$$\Delta F_L^{\alpha\beta}(T) = F_L^{\alpha\beta} - F_L^{\alpha\alpha} \quad (1)$$

(ただし、 $F_L \sim L^d$ 、 d は次元)、剛性指数は

$$\Delta F_L^{\alpha\beta} \sim L^{a_{\alpha\beta}}(T) \quad (2)$$

で定義される。 $a(T)$ の陽な L 依存性は T 依存性に比べ無視できる³⁾。界面が漂うような境界条件では ΔF は異常部分のみとなる。したがって、 $T <, =, > T_c$ に対し、 $a >, =, < 0$ となる。 a は低温では一定 a_0 となる。通常の相ではよく知られているように不連続と連続スピンに対して $a_0 = d-1, d-2$ となるが、IOP では非整数となり、IOP の種類に依存した一定値をとると考えられる。 $d-1$ よりの減少が不完全性により剛性が柔らかくなったことを表す。

ΔF の計算は $T > T_c$ に対して $\Delta F = 0$ を利用する。通常の MCS で得た ΔE から ΔS を求めるので、通常の MCS と同程度の時間で精度いい計算が可能である。この方法はそれ以外に

多くの点で優れた性質を持つ。(i) ΔF の優れた性質 [異常部分のみ、高精度の計算可能、理想的な有限サイズスケーリングの形 $\Delta F = f(tL^{1/\nu})$ 、相転移の存否の明確な判定、 T_c の精度いい決め方]。(注、式(1)の形はスケーリングの上のみならず、どんな剛性指数を持った相に対しても利用可能)(ii) 臨界指数の合理的な決定法 [$a(T) = 0$ から T_c の決定、同じデータによる ν の評価。秩序変数の自乗の計算結果から $M_2 = L^{-2\beta/\nu} m(tL^{1/\nu})$ と $m(x) \sim x^{-\gamma} (T > T_c)$ を使い、 β, γ の評価。(iii) 種々の境界条件に対する $\{a_{\alpha\beta}\}$ と界面のプロファイルによる秩序相の性質の多角的研究^{2,3)}。(iv) 固定境界条件による熱平衡化の加速 [IOP 相や 1 次転移を生じるような緩和の遅い系にも適している]⁴⁾。(v) エントロピーの役割を調べるの適している。(vi) 界面自体の研究にも適している。(vii) ランダム系に対しても同じく強力 (詳しくは ref.9)。

3. 3次元反強磁性ポッツモデル (立方格子) ¹⁾

Banavar らによって q 状態反強磁性ポッツモデルは $(q-1)$ 成分ベクトルモデルと等価な相転移を示すことが予測された⁵⁾。最近 Wang らは $q=3$ の場合に XY モデルを示唆する結果を得ている⁶⁾。我々は上記の方法によって、 $q=3, 4, 5$ は 2 次相転移を示し、 $q=6$ は相転移がないことを得た。図 2 は我々の得た転移点と剛性指数を示す。なお、境界条件は各 IOP が最大にねじれるように課した。更に表 1 に我々が得た $q=3, 4$ の臨界指数をベクトルモデルのと比較する。独立に得られた ν, β, γ はスケール則をよく満たす。 α は粗い計算によるが、 $\alpha = 2 - d\nu > 0$ とコンシステント。明らかに a_0 は非整数で、また臨界指数は新しいユニバーサルクラスであることを示す。

4. 3次元6状態クロックモデルとその関連したモデル

1) 6状態クロックモデル³⁾

3状態反強磁性ポッツ (3AFP) モデルでの Wang らとの不一致をはっきりさせるために我々は 3次元6状態クロックモデル (6CL) を調べた。なぜなら 2次元と同じようにこれは 3AFP モデルと等価であることが期待でき、また XY 性がどうかを調べるのに最適だからである。3AFP モデルに弱い次隣接強磁性相互作用を入れれば、低温相は各部分格子でのスピン状態が明確に決まった相、例えば 1 と 2 であるような相 (1,2) 等と、中間相は (1,2) と (1,3) が混合した IOP[1,2/3] 等となる。従って IOP[1,2/3] が 6CL モデルでの IOP[0/1] に対応する。

境界条件 $\alpha\beta$ として一端が $\alpha = 0$ 状態で他端が $\beta = 1, 2, 3$ の 3 種類を課した。もし中間相が XY 的なら $a(01) = a(02) = a(03) = 1$ になるはずである。他方、もしそれが IOP なら $a(01) < 0, \forall a(02) = a(03) > 0$ となろう。結果は図 3 に示すように明瞭に IOP の存在を $T \cong 2.7$ と 3.0 の間に示した。臨界指数の計算に比べるとこの方法は簡単でしかも明確に区別できる。しかも $a(02), a(03) \cong 1.2$ となり、高温側の転移での臨界指数 $\nu \cong 0.57$ も得たの

で、両モデルの IOP は完全に一致すると言える。なお、これらの剛性指数と臨界指数の値は以下に触れる 3 次元積層 3 角反強磁性体イジング (STRAFI) モデルの IOP の値とも一致する。

低温側の相転移は Landau 理論で考えられた対称性変化の範ちゅうに入らない特異性を持つ。即ち、IOP も低温相もその対称性はいずれかの部分群になっていない (図 1)。その結果、非常に大きな転移領域 ($0 < a(01) < 2$ の間) を持つと考えられる。

2) 一般的 6 状態クロックモデル⁴⁾

一般化した 6CL モデルは再隣接スピン間のエネルギーレベルに関して 2 つのパラメータ $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ を持つ。簡単のために $\varepsilon_2 = 2$ として、 $0 < \varepsilon_1 < 2$ とする。 $\varepsilon_1 = 0$ のとき 3AFP モデルに近く、 $\varepsilon_1 = 2$ は 6 状態強磁性ポッツモデルに等しい。大ざっぱに図 4 の相図を得た。ここで注目すべきことは期待通り IOP が ε_1 が小さい領域に生じ、しかもそれが 2 つの型 IOP(I) と IOP(II) を持つことである。IOP(I) は既に 6CL と 3AFP モデルで得たものだが、IOP(II) は STRAFI モデルで得たものに等しく、 $a(01)$ は負でなく、 $a(02)$ と $a(03)$ に等しく、値も IOP(I) と同じである。したがって、IOP(II) は 2 つの IOP(I) である $[0/1]$ と $[1/2]$ との 2 重混合相である。 $[0/1]$ ではドメイン 0 と 1 より成るので、この相は状態 0 と 1 のドメイン領域と 1 と 2 のドメイン領域を持つ。あるいは、1 状態の海の中に 0 と 2 のドメインがある相関を持って棲み分けていると考えることもできる。IOP(II) は IOP(I) よりエントロピーが大きいので当然高温側にある。両相は剛性指数も臨界指数も等しいので両者の区別は 2 次的な量によるのだろう。もう 1 つ注目すべき点は、 ε_1 が 1 に近づくとき IOP が 1 次転移線に収束することである。これは IOP の大きなエントロピーが 1 次転移の潜熱に変化したと考えられ、エントロピーの役割を考える上で興味ある。

3) 積層反強磁性イジングモデル²⁾ 弱い次近接強磁性相互作用を持つこのモデルでは、低温相は 3 部分格子に $(\uparrow, \downarrow, \uparrow)$ 等の秩序を持ち、中間相は IOP(I) ではなく IOP(II) のみである。即ち、隣あった $(\uparrow, \downarrow, \uparrow)$ と $(\uparrow, \downarrow, \downarrow)$ から成り、1 部分格子が無秩序である IOP(I) $[\uparrow, \downarrow, \uparrow / \downarrow]$ は実現せず、それと $[\uparrow / \downarrow, \downarrow, \uparrow]$ が混合した IOP $[\uparrow / \downarrow, \downarrow, \uparrow / \downarrow]$ が生じる。注意すべきことは $\uparrow / \downarrow$ の部分格子では磁化は一般には消えない。

5. その他のモデル

1) Restricted Solid-On-Solid モデル⁷⁾

このモデルは結晶面のラフニング現象を記述する SOS モデルに面の高さの変化を $\Delta h = 0, \pm 1$ に制限したものである。正方格子上で次隣接相互作用も持つ。

$$H = J \sum_{nn} \delta(|h_i - h_j| - 1) + K \sum_{nnn} \delta(|h_k - h_l| - 2) \quad (3)$$

K/J のある領域 ($J, K > 0$) では、低温相は滑らかな面を持つ flat 相で、中間相では面は隣あった 2 つのレベル上に分布する disorderd flat(DOF) 相で、ちょうど図 1 の IOP と同じ状

態にある。ミクロには2つのレベルがドメインをつくり面を分割している。高温相は面の高さが決まらない rough 相である。異方性の極限ではこのモデルは $S=1$ の1次元量子反強磁性モデルになり、DOF 相が Haldane gap 相⁸⁾になることが得られている。

DOP 相は高いエネルギー障壁 (K) の中で低いエネルギー障壁 (J) を越えてエントロピーを得るように2つの高さの面による分割構造を保ちながら揺らいでいる。Haldane gap 相は量子化軸方向と量子的揺らぎの両エネルギーを稼ぐように相対的位相を揃えたスピン状態をとっている。後者のエネルギーがエントロピーに対応する。

2) スピングラス ($\pm J$ イジングモデル)

これも剛性指数が非整数だから IOP の1種と考えられるだろう。対称分布のときは $\tilde{W} = \langle \Delta F_L(\{J\}) \rangle \sim L^{\tilde{a}}$ を調べる。境界条件は上向きと下向きのスピン状態なので、その力はスピングラス秩序へは部分的にしか作用しないので、結局 $2\tilde{a}$ が正しいスピングラスの剛性指数 a_{SG} となる⁹⁾。更に秩序の空間的ゆらぎを考慮すれば、Bray と Moore の結果 ($\tilde{a} \cong 0.2$) よりも大きくなる ($a_{SG} > 0.4$) が⁹⁾、非整数であることには間違いないだろう。当然、秩序の不完全性は空間に依存するが、非整数はその依存性がフラクタル的性質を表していると考えられる。この点からの研究は興味深い。しかし規則系とは異なり、多分エントロピーは効いていないだろう。

6. まとめ

我々の研究結果は不完全秩序相が次の性質を持つことを示唆している。(i) 剛性指数は非整数で、対称性によって異なった値を持つ。即ち、それはユニバーサルな値であること。(ii) 高温側の相転移は各々新しいユニバーサリティクラスに属す。低温側では Landau 理論の対称性変化とは異なる2次相転移を起こす。(iii) Z_6 の対称性を持つモデルは2つの型の IOP 相を持ちうる。(iv) 規則系ではエントロピー利得とエネルギー障壁によって安定化する。従って基底状態のみならず、中間エネルギーの状態密度の高い系に存在し易い。

これらの研究結果からモンテカルロ界面的方法が非常に有効であることが判明した。一般的に言えば、この方法は外力あるいは内力によって系のサイズ規模の歪みあるいは欠陥をつくり、それによって生じた自由エネルギー増分のサイズ依存性によって研究する方法と言える。従って、今後更に大きく発展する可能性を持つ。

今後の研究課題としては、非整数 a_0 と界面の詳細な性質との関係、低温側の相転移の臨界的性質、エネルギーレベルの不連続性の効果について、2次元スピン系での IOP の可能性、IOP からのスピングラスの研究、IOP の緩和現象、理論解析による研究、実験からの研究等沢山ある。

以上の研究は次の人々との共同研究の成果であり、各氏に対し感謝したい。孫剛、小野~~晃~~郎、三坪喜久男、尾関之康、加園克巳。

文献

- 1) Y. Ueno, G. Sun and I. Ono: J. Phys. Soc. Jpn. 58(1989) 1162; G. Sun, Y. Ueno and Y. Ozeki: J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 156.
- 2) K. Mitubo, G. Sun and Y. Ueno: *Cooperative Dynamics in Complex Physical Systems*, ed. H. Takayama (Springer, Berlin, 1989) p.49.
- 3) Y. Ueno and K. Mitubo: to be published in Phys. Rev. B.
- 4) Y. Ueno and K. Kazono, in preparation.
- 5) J. R. Vanavar, G. S. Grest and D. Jasnow: Phys. Rev. B25(1982)4639.
- 6) J. Wang, R. Swendsen and R. Kotecký: preprint.
- 7) M. den Nijs and K. Rommelse: Phys. Rev. B40 (1989) 4709.
- 8) F. D. Haldane: Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1153.
- 9) Y. Ueno and Y. Ozeki: submitted to J. Stat. Phys.

図1。3次元6状態クロックモデルのIOP(a)と低温相(b)におけるスピン状態の分布

図2。3次元 q 状態反強磁性ポッツモデルの転移点 T_c と剛性指数 a_0

図3。3次元6状態強磁性クロックモデルの剛性指数の温度依存性(o, Δ , $\times$ は各々境界条件0-1、0-2、0-3に対する)

図4。3次元一般的6状態クロックモデルの相図(横軸 ϵ_1 は $\frac{1}{2}$ 倍してある)

表1。3次元 $q=3,4$ 反強磁性ポッツモデルの臨界指数($n=2,3$ ベクトルモデルとの比較)

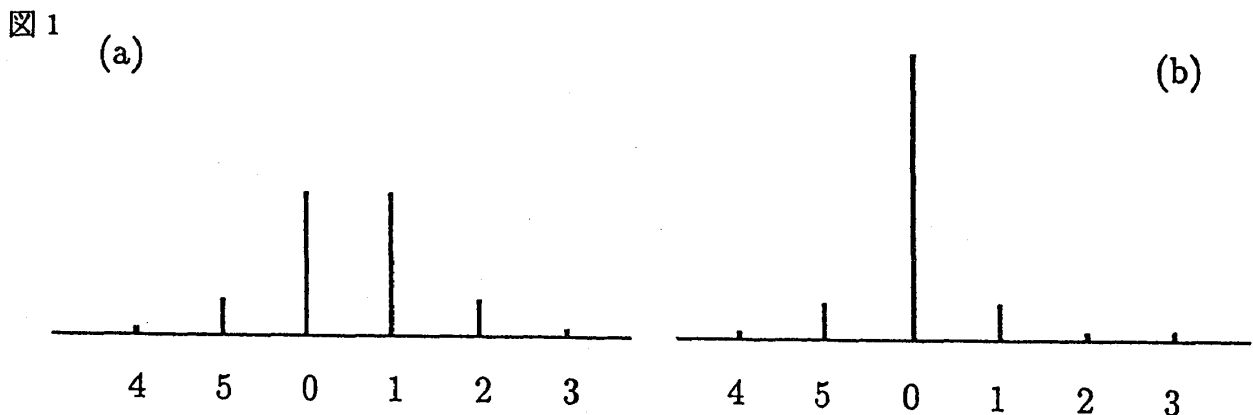


図 2

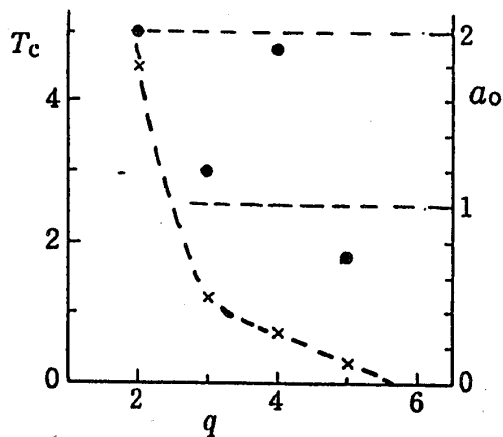


図 3

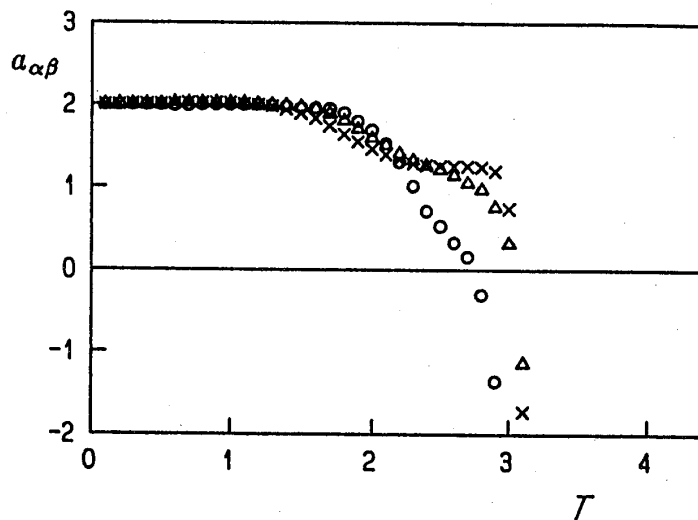


図 4

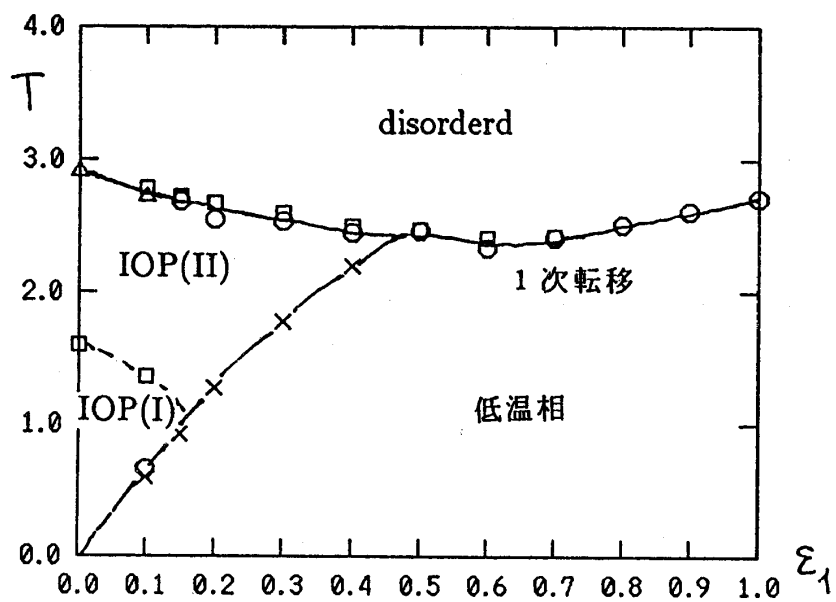


表 1

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