

§ 1. はじめに

フラストレーション(frustration:FR)がスピングラスの本質的要素であることがToulouse¹⁾によって指摘されて以来、多くのFRモデルが集中的に研究されている。²⁾⁻⁶⁾ 特に2次元の規則的FRモデルは、厳密な取扱いが可能なこともあって詳しく調べられている。これまでに知られているモデルには、奇モデル、⁷⁾ドミノモデル、⁸⁾層状FRモデル⁹⁾等がある。本研究では、数値的方法を用いて明らかにした層状FRモデルの相転移の様相について報告する。

Vdovichenkoのrandom walk¹⁰⁾の方法を用いると、2次元の週期的なボンド配置を持つイジング系の分配関数 $Z(K)$ は、逆格子空間(q 空間)の成分 $Z(q, K)$ の積の形に書ける： $Z(K) = \prod_q Z(q, K)$ 、 $K = J/k_B T$ 。任意の週期的なボンド配置に対して $Z(q, K)$ を数値的に求める方法を考案した。¹¹⁾ 自由エネルギーは q についての2重積分を 96×96 点のガウス積分を用いて計算した。 $Z(q, K) \rightarrow 0$ となる q_c と K_c が不安定性を示すモードと転移温度を与える。 q 空間内の q_c の対称性からそのモードのスピンの配置が決る。以下に示すようにリエントラント現象を示す場合には、各モードのスピンの配置を決める事が重要になる。

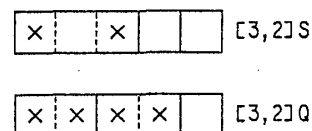
§ 2. 層状フラストレーションモデル(LFR)

LFRモデルは2次元正方格子上的イジング系である。ボンドは $\pm J$ の値をとり、横方向のボンドはすべて $+J$ である。これに対して縦方向には、 $+J$ のボンドが n_+ 本と $-J$ ボンドが n_- 本あって、 $n_+ + n_-$ の週期で並んでいる。このモデルでは縦方向の $-J$ ボンドの位置によってFRの配置がきまる。これを $[n_+, n_-]$ モデルと呼ぶことにする。縦方向のボンドの平均の大きさは $\varepsilon J = (n_+ - n_-)J / (n_+ + n_-)$ で定義される。同じ ε を持つがFRの配置が異なるモデルが幾つかある。

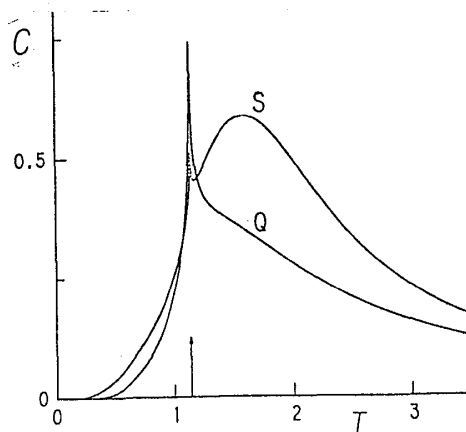
第1図は $[3, 2]$ モデルの単位胞を例示している。実線は $+J$ ボンドを、点線は $-J$ ボンドを表している。また正方形の内部の×印は、その正方形がフラストレートしている事を示している。四重のFR層を持つモデルをQ、一重のFR層を二本持つモデルをSと呼んで区別することにする。Hoeverら⁸⁾によるとLFRモデルでは： $\sinh 2K_c \cdot \sinh 2\varepsilon K_c = 1$ ($K = J/k_B T$) で決る転移点 T_c で相転移を起こす。 $[3, 2]$ モデルでは $\varepsilon = 0.2$ であるので $T_c = 1.1416$ である。FRの配置が異なっているにも拘らず同じ温度で相転移を起こすという点で、FRの性質と関連して非常に興味もたれている。

第2図は、§1で述べた方法を用いて計算した $[3, 2]$ モデルの比熱である。Hoeverらの予測した転移温度で対数的発散を示している。発散の振幅は、FRの配置の差を反映した明らかな差がある。零点エントロピーはQモデルでは残っており、Sモデルにはない。この差は転移温度には関係していない。 $[4, 2]$ 、 $[5, 2]$ モデルでも同じ傾向を示す。

これに対して $[n, n]$ モデルでは、Hoeverらの予測では $T_c = 0$ である。これと一致して、比熱の発散は見られない。



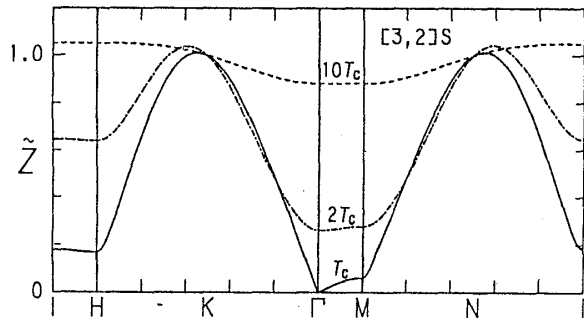
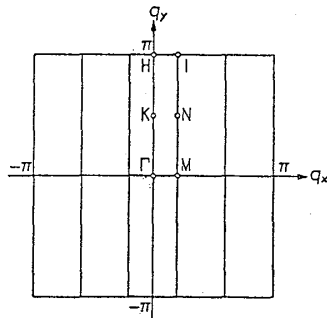
第1図。[3,2]モデルの単位胞



第2図。[3,2]モデルの比熱

§ 3. [3,2] モデルの $Z(q, K)$ の分散関係

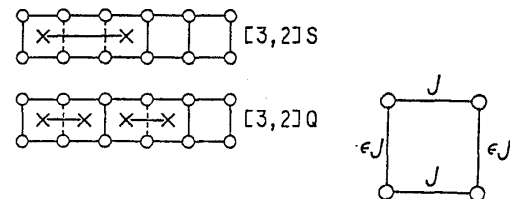
比熱からは転移温度と臨界挙動しか分からないが、 $Z(q, K) \rightarrow 0$ となる q_c と K_c からは秩序相のスピンの配置と転移温度についての知見が得られる。第1図に示した[3,2]モデルの単位胞に対する q 空間の単位胞は、第3図に示したようにイジング規則系に比べて q_x 方向に $1/5$ 小さくなっている。 q 空間の対称点に図に示したような名称を付けておく。 $Z(q_x, q_y, K)$ は N 点 $(\pi/5, \pi/2)$ の値で規格化してある。第3図。[3,2]モデルの q 空間の単位胞

第4図。[3,2] S モデルの $T \geq T_c$ の分散関係(a) [3,2] モデルの $T_c = 1.1416$ で相転移をする秩序相の性質

Q と S の二つの[3,2]モデルは同じ T_c を持つ。 T_c より高温での分散関係の様相は非常に良く似ている。第4図に S の $T \geq T_c$ での分散関係を示す。 $T = \infty$ から出発して T が下がると Γ 、 M 、 H 、 I の各点で Z が下がり始める。 $T = T_c$ で Γ 点が先に0になる。即ち $q_c = (0, 0)$ が不安定性を示すモードである。 q_c の対称性から秩序相の単位胞の大きさは、常磁性相のそれと同じである事が分かる。スピンは第5図に示したような配置をしている。ここで白丸は上向きのスピンを表している。 $\times$ 印と $\times$ 印の間の線は、それと交差するボンドがフラストレートしている事を示している。

T_c 以下では第5図の単位胞が無窮距離に至る迄整列することにより長距離秩序が生じる。長波長のスケールで見ると第5図の単位胞は、第6図の様な異方的なボンドの大きさを持つイジングモデルの単位胞と等しいので、同じ臨界挙動を示す。特に転移温度はOnsagerの解から決る。これがHoefferらが与えた式の物理的意味である。

第5図。[3,2]モデルの秩序相のスピン配置

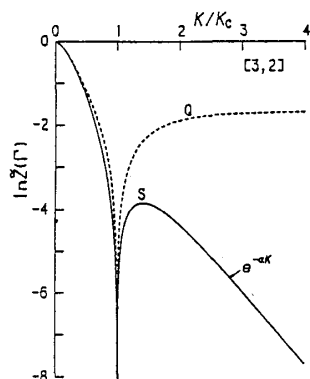
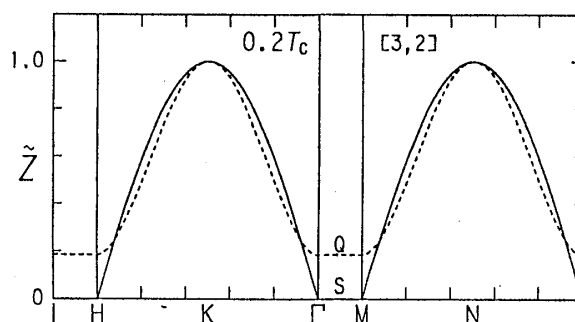


第6図。異方的イジングモデルの単位胞

T_c を越えると Γ 点は0でなくなる。転移点近傍での分散曲線は次の形をしている： $Z(q_x, q_y, K) = [(a q_x)^2 + (b q_y)^2 + (c \Delta K)^2]^{1/2}$, $\Delta K = K_c - K$. 自由エネルギーの特異部分は $\ln Z$ を Γ 点の周りで積分する事により得られる。これから比熱の対数的発散が出る。第2図の比熱の振幅の比は、係数 b の違いとして説明できる。

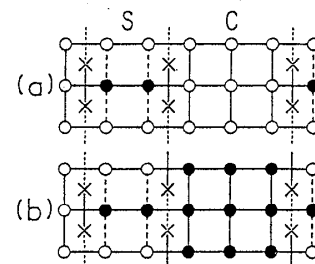
(b) T_c 以下の分散関係

T_c 以下の分散関係は、 S と Q で完全に異なる。 Γ 点で Z は第7図に示したような温度変化をする。 Q では T_c 以下で一定値に近づく。これに対して S では十分低温で指数関数的に0に近づく： $\Delta Z = Z(0, 0, K) \sim e^{-aK}$, $a = 2.6$. 分散関係は第8図に示した。 Γ と H の値は等しくなり、 $\Gamma - H$ 、 $I - H$ は完全に平である。 $\Gamma - M$ 、 $H - I$ 線は臨界線を形成する。 $\Gamma - M$ 線の周りの分散曲線は次のようになる： $Z(q_x, q_y, K) = [(b q_y)^2 + (\Delta Z)^2]^{1/2}$. $\ln Z$ を $\Gamma - M$ 線の近傍で積分する事により、自由エネルギーの特異部分は次式で与えられる： $F_{sing} \sim T e^{-aK}$. 自由エネルギーは $T \rightarrow 0$ で弱い特異性を持つ。これは、 $T = 0$ が転移温度である連続次の相転移である事を示している。

第7図. [3,2] モデルの $Z(0,0,k)$ の温度変化第8図. [3,2] モデルの $T_c > T$ の分散関係

(c) [3,2] S モデルの基底状態のスピンの構造

[3,2] S モデルでは、 $T=0$ で $\Gamma-M$ 、 $H-I$ 線が臨界線を形成している。これは、スピンの構造が y 方向には常磁性の単位胞の長さの倍になっており、 x 方向には週期性を持たない事を意味している。第9図に [3,2] S モデルの単位胞を構成する2種類のスピンの配置を与えた。白丸は上向きスピンを、黒丸は下向きスピンを表している。(b)のスピンの配置は、(a)のスピンの配置のCの領域のスピンの向きを零エネルギーグループに沿って反転する事によって得られるもので、エネルギーは等しい。この二つのスピンの配置を組合わせる事により、 y 方向には元の単位胞の長さの倍であり、 x 方向には幾らでも長い単位胞が考えられる。これらは総てエネルギー的には等しい。または第9図のCの領域のスピンの向きが乱雑に並んでいるために、 x 方向に週期性がないと考えてもよい。 $\Gamma-M$ 、 $H-I$ 線が平になるのは、この様なスピンの構造を考える事により説明出来る。この様なスピンの構造では(a)と(b)が同じ確率で現れるので、 x 方向の相関が打ち消されて遠くには伝わらない。従って通常の意味の長距離秩序度は無い。これが $T=0$ で連続次の相転移をする原因である。



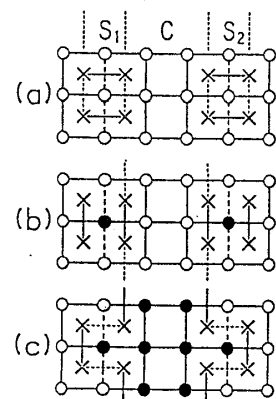
第9図. [3,2] S モデルの単位胞を構成するスピンの配置

(d) [3,2] S モデルのリエントラント現象

[3,2] S モデルは、有限温度で比熱が対数的に発散するイジング型の相転移を起こし、さらに $T=0$ で q 空間に臨界線を形成する連続次の相転移を起こす。即ちリエントラント相転移を行い、第9図に与えたスピンの配置から、第5図に与えたスピンの配置に相転移を行う。第5図のスピンの配置は、第9図のの比べてエネルギーは高いが、スピンの向きが総て揃っているのので、長距離秩序を形成するのに有利なためである。

(e) [3,2] Q モデルの基底状態のスピンの構造

[3,2] Q はFRの2重層を含む。この為に有限の長さの零エネルギーグループが存在し、その中のスピンを反転してもエネルギーは変わらない。この様な縮退した状態が零点エントロピーを生じる。第10図に [3,2] Q モデルの単位胞を構成する3種類のスピンの配置を与えた。(b)のスピンの配置は、(a)のスピンの配置で零エネルギーグループ内のスピンの向きを反転する事によって得られる。零エネルギーグループに沿ってスピンの向きを反転する事により、(c)のスピンの配置は(b)のスピンの配置から、(a)のスピンの配置は(c)のスピンの配



第10図. [3,2] Q モデルの単位胞を構成するスピンの配置

置から得られる。これらのエネルギーは等しい。(a)と(b)では隣り合うCのスピンは平行であり、(c)では反平行である。これらを組合わせると、y方向には元の単位胞の長さの倍であり、x方向には幾らでも長い単位胞が考えられる。これが $\Gamma-M$ 、 $H-I$ 線が平になる原因である。(b)と(c)は同じ確率で現れるので相関は打ち消し合うが、(a)が有るために相関が残る。(a)だけで構成されるスピン配置は、第5図に与えたスピン配置と等しい。これが $[3,2]Q$ では、低温で長距離秩序が残る要因となっている。⁴⁾

§3. 結 び

$[3,2]Q$ モデルは、有限温度で比熱が対数的に発散するイジング型の相転移を起こす。これに対して $[3,2]S$ モデルでは、この様な相転移に加えて $T=0$ で q 空間に臨界線を形成する連続次の相転移を起こす。即ち $[3,2]S$ モデルは、リエントラント現象を示す。この違いは、FRの配置に起因している。FRが2重層をなしている時は、有限の長さの零エネルギーローブが存在し状態の縮退を生じる。これらの状態の中には、相関を伝えるスピン配置が存在している。^{4), 6)}これに対して1重層の時には、零エネルギーローブは無限の長さのものしか存在しないために、基底状態では相関を断ち切るスピン配置しか存在し得ない。有限温度となると励起状態を通じて相関が伝わり得るようになる。³⁾⁻⁵⁾ $[4,2]$ 、 $[5,2]$ モデルでも同じ傾向を示す。 $[n,n]$ モデルでは、 q 空間に臨界点を形成する連続次の相転移と臨界線を形成する連続次の相転移が $T=0$ で共存している。

スピングラス状態は、位相空間の中で高次に縮退していると推測されている。²⁾LFRモデルでは、一次元方向にはあるがこの様な状態を実現しているので、スピングラスを考える上で有益なモデルを与える。

以上で明らかにした様に、 $Z(q, K)$ の分散関係についての知見がFRモデルの相転移機構の解明に重要である。本研究で用いた数値的方法は、他のFRモデルの相転移の研究にも有効であると考えられる。

文 献

- 1) G. Toulouse: Commun. Phys. 2 (1977) 115.
- 2) G. Toulouse: Disordered Systems and Localization, Lecture Notes in Physics 149 (Springer-Verlag, Berlin 1981) p.166, and references therein.
- 3) S. Miyashita: Prog. Theor. Phys. 69 (1983) 714.
- 4) T. Oguchi: J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1983) 3101.
- 5) Y. Ueno: J. Phys. Soc. Jpn. (to be published).
- 6) A. Sutö: J. Phys. A. 14 (1981) 2733.
- 7) J. Villain: J. Phys. C 10 (1979) 1717.
- 8) G. André, R. Bidaux, J. P. Carton, R. Conte and L. de Seze: J. Physique 40 (1979) 479.
- 9) P. Hoever, W. F. Wolff and J. Zittartz: Z. Phys. B41 (1981) 43.
- 10) N. V. Vdovichenko: Soviet Phys. 20 (1965) 477.
- 11) H. Betsuyaku: to be published