

状態密度を計算するモンテカルロ法を用いた Fisher 零点の研究

東京都立大学 理学研究科 岡部 豊¹

複素温度平面上の状態和の零点 (Fisher 零点) 分布は、相転移研究の有力な手段である。ここでは、エネルギー状態密度を計算するモンテカルロ法を利用して、準結晶上のイジングモデルの Fisher 零点を議論する。規則格子の場合と異なり、準結晶上のイジングモデルの零点は、ある曲線上に乗るのではなく複素平面で広く分布することを示し、また有限サイズスケーリングの性質について議論する。

1 状態和の零点

Yang-Lee [1] の先駆的な研究以来、複素平面上の状態和の零点分布が議論されてきた。Yang-Lee は磁場変数に関する零点を取扱い、イジングモデルの複素アクティビティ ($e^{-2H/kT}$) 平面における状態和の零点が単位円上にあることを示した。これに対して、Fisher [2] は複素温度平面における状態和の零点を論じた。この議論はいろいろな相互作用をもつ系に拡張され、複素平面上の状態和の研究は相転移の有力な研究手段となっている。Derrida 等 [3] による研究を初めとして、最近、ヒエラルキー構造をもつ格子上の状態和の零点に興味をもたれている [4, 5]。ここでは最も基本的な自己相似性の構造をもつ準結晶上のイジングスピン系の状態和の零点を議論する。

その前に2次元規則格子上の Fisher 零点について整理をしておく。複素変数として $a = e^{2J/kT}$ をとったときの零点を図1に示す。他に $e^{-2J/kT}$, $e^{4J/kT}$, $\tanh(2J/kT)$ などの変数に関する零点を用いる場合もあることを注意しておく。

さて、変数 $a = e^{2J/kT}$ に関する状態和の正の実軸上の零点が転移点を与える。蜂の巣格子と三角格子、ダイス格子とカゴメ格子は互いに双対であり、正方格子は自己双対格子である。表1に、

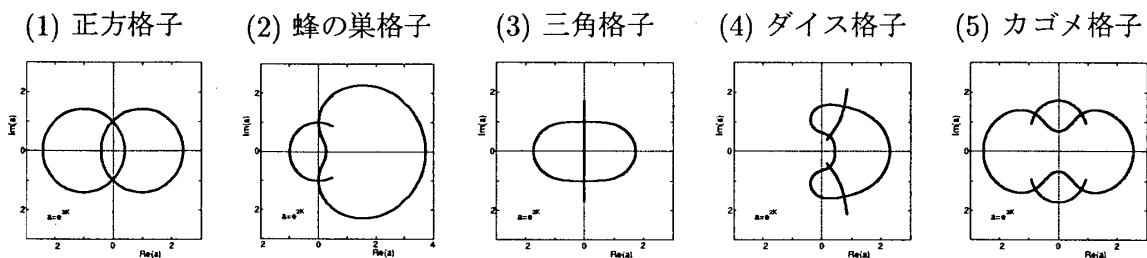


図1: 2次元規則格子上のイジングモデルの Fisher 零点

¹E-mail: okabe@phys.metro-u.ac.jp

表 1: 正方格子、ダイス格子、カゴメ格子、ペンローズ格子、双対ペンローズ格子の比較

| 2次元格子 | 正方 | ダイス | カゴメ | ペンローズ | 双対ペンローズ |
|------------------|-------|---------|-------|---------|---------|
| z (平均) | 4 | 3,6 (4) | 4 | 3-7 (4) | 4 |
| bipartite | yes | yes | no | yes | no |
| frustration (AF) | no | no | yes | no | yes |
| イジングの T_c/J | 2.269 | 2.406 | 2.143 | 2.392 | 2.150 |

いろいろな2次元格子を比較してある。最近接格子点数 (z) が4, あるいは平均として4である格子を取り上げてある。後に議論する準格子である、ペンローズ格子、双対ペンローズ格子もあげてある。2つの副格子分解ができるか (bipartite であるか)、それと反対のことであるが、反強磁性系の場合にフラストレーションを生ずるかどうかを示してある。また、イジングモデルの転移温度 (T_c/J) も与えてある。なお、規則格子のイジングモデルの転移温度は厳密な値である。

2 準結晶上のスピン系

準結晶の発見 [6] 以来、準格子の構造だけでなく、準格子上的スピン系の相転移などの物理系の性質が研究されてきている [7, 8]。準格子は規則格子とランダム系の中間的な性質をもつといえるので、スピン系の相転移に関して、次のような問を投げかけることができる。(1) 準格子上的スピン系の臨界現象は規則格子やランダム系の臨界現象と異なるか? (2) 長さスケールの自己相似性が臨界現象に何か役割を果すか?

岡部-新関 [7] は、ペンローズ格子上的イジングモデルをモンテカルロ法により研究し、転移温度と臨界指数を精度良く評価して、臨界現象は規則格子上的イジングモデルと同じであること、すなわち、同じユニバーサルクラスに属することを示した。また、ペンローズ格子の格子点にスピンを置くのではなく、その中心にスピンを置くことにより、双対格子を作ることができ、これを双対ペンローズ格子とよぶことにする。この双対格子上的イジングモデルをモンテカルロ法を用いて調べ、規則格子の双対格子の転移温度の間に成り立つ双対関係

$$\sinh(2J/T_c) \sinh(2J/T_c^*) = 1 \quad (1)$$

が準格子の場合についても成り立つことを示した [7]。ここで T_c^* は双対格子の転移温度である。

表 1 には、ペンローズ格子および双対ペンローズ格子上的性質もまとめてある。注意することは、平均的な最近接格子点数は4であり、また、2つの副格子分解が可能かどうかということなど、ペンローズ格子はダイス格子と、双対ペンローズ格子はカゴメ格子とその構造が似ている。

シミュレーションを実行する際に、岡部-新関 [7] は、周期ペンローズ格子を用いた。ペンローズ格子には、無理数である黄金比 $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 = 1.618\dots$ が現れるが、黄金比を連続するフィボナッチ数の比で近似することにより、周期ペンローズ格子を作ることができる。これは無理数を連分展開して有限に止めることに対応する。その結果、スピンの数は、 $N = 199, 521, 1364, \dots$

などの特定の値をとることになる。このとりうる N の値は、ほぼ $\tau^2 = \tau + 1 = 2.618$ ずつ増加する。

3 状態密度を計算するモンテカルロ法

Fisher 零点を数値的に求める試みは古くからなされ、比較最近も、例えば、蜂の巣、三角、ダイス、カゴメ格子上のイジングモデルの Fisher 零点の計算がなされているが [9]、そのサイズは小さい。大きなサイズの系の Fisher 零点を議論するには、エネルギー状態密度の精度のよい計算が必要である。正方格子の場合には、Mathematica を用いた厳密な計算が可能であるが [10]、そのような方法がない場合には、モンテカルロ法を用いる。

マルチカノニカル法 [11, 12] を始めとして、状態密度を直接計算するモンテカルロ法が発展してきているが、ここでは Wang-Landau 法 [13] を用いてエネルギー状態密度を求めることにする。状態和は

$$Z = \sum_E g(E) e^{-\beta E} \quad (2)$$

と表されるが、イジングモデルの場合は、とりうるエネルギーは

$$E = E_0, E_0 - 2J, E_0 - 4J, \dots$$

に限られる。ここで E_0 は最高エネルギー（反強磁性系の基底状態エネルギー）である。従って、 $a = e^{2\beta J}$ を用いて

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_{n=0} g(E_0 - 2nJ) a^n \quad (3)$$

と表すことができる。なお、最近接格子点の数が偶数の場合には、とりうるエネルギーは $2J$ の単位ではなく、 $4J$ の単位となる。

a を複素数として、式 (3) の零点を求めればよいのであるが、大きなサイズの格子については、状態密度の係数が大きくなるので、零点を決定するのがむずかしくなる。ここでは、Alves 等 [14, 15] による方法を用いて、零点を求めることにする。

4 ペンローズ格子上のイジングモデルの零点

周期的ペンローズ格子上のイジングモデルのエネルギー状態密度の対数を Wang-Landau 法を用いて計算した結果を図 2 に示す。これは $N = 199$ の場合である。ペンローズ格子は bipartite であり、 $E \rightarrow -E$ の対称性がある。一方、双対ペンローズ格子は bipartite ではなく、反強磁性系の場合にフラストレーションが生じ、 $E \rightarrow -E$ の対称性はない。なお、双対ペンローズ格子の反強磁性系の基底状態はフラストレーションのために縮退を生ずる。残留エントロピーのサイズ依存性を調べることにより、サイズが無限の極限における残留エントロピーが計算できるが、ここではその詳細は省略する。

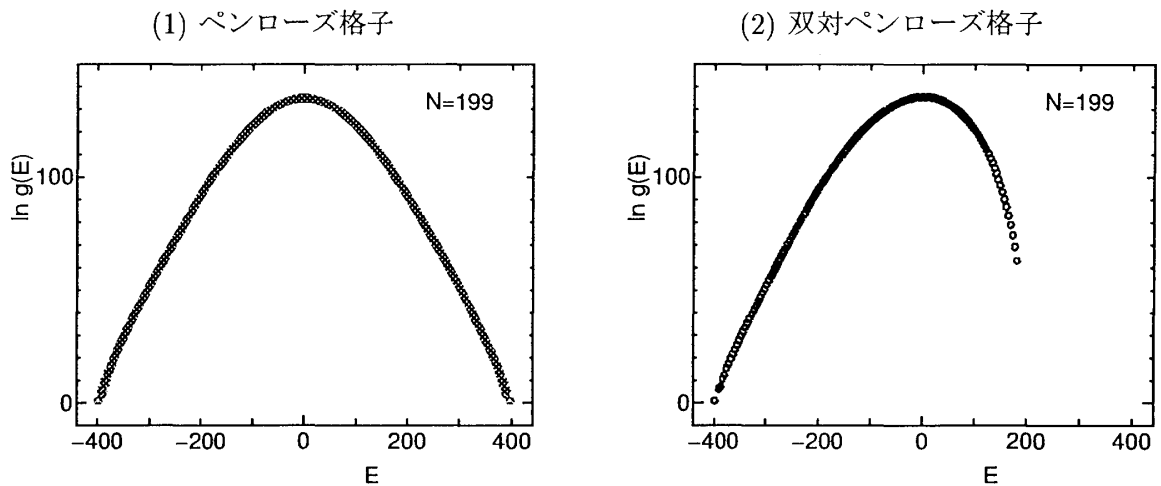


図 2: 準格子上的イジングモデルの状態密度

また、秩序パラメータの E 依存性の計算から状態密度と合わせて、秩序パラメータの温度依存性が得られる。その温度依存性から有限サイズスケーリングを用いて計算される転移温度、臨界指数は、以前に求めた値 [7] と一致する。

ペンローズ格子上的イジングモデルの複素 a 平面の状態和の零点を図 3 に示す。 $N = 199$ と $N = 521$ の結果をペンローズ格子と双対ペンローズ格子の場合に示してある。ペンローズ格子は bipartite であるので、フラストレーションはなく、サイズ無限大の極限で正の実軸上に 2 つの零点がある。 $E \rightarrow -E$ の対称性を反映して、 $a \rightarrow 1/a$ の対称性がある。双対ペンローズ格子の場合には、フラストレーションがあるので、サイズ無限大の極限で正の実軸上の零点は 1 つである。 $E \rightarrow -E$ の対称性がないので、 $a \rightarrow 1/a$ の対称性はない。最近接格子点の数は 4 であり偶数であるので、状態和は a^2 の関数となる。従って、 a の虚軸に関して対称となっている。ペンローズ格子の場合には、最近接格子点の数は奇数の場合もあるので、虚軸に関する対称性はない。

ペンローズ格子はダイス格子と、双対ペンローズ格子はカゴメ格子の零点分布と共通点をもつ。しかし、図 3 から、規則格子の場合と異なり、準結晶上のイジングモデルの零点はある曲線上に乗るのではなく、複素平面上に広く分布することがわかる。また、正の実軸に近い零点から求まる

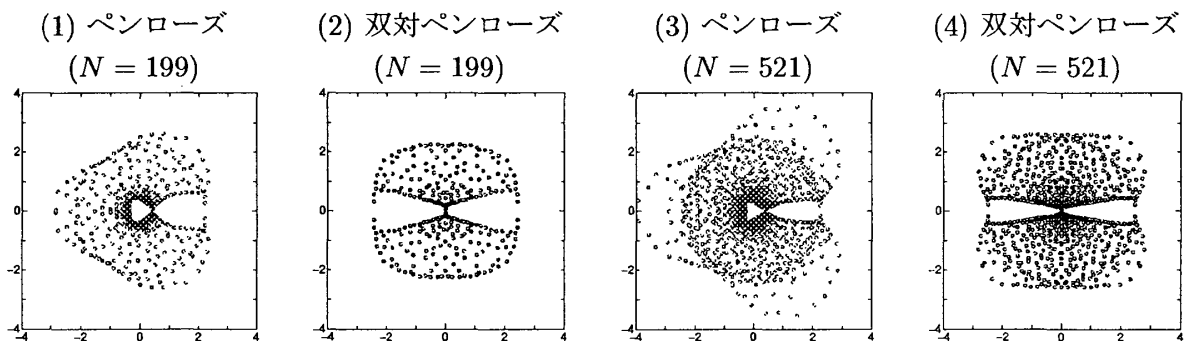


図 3: 準格子上的イジングモデルの Fisher 零点

転移温度は、秩序パラメータの温度依存性から求めた転移温度と一致する。有限系の正の実軸に最も近い零点 $a^0(L)$ と無限系の転移温度 a_c の差が有限サイズスケーリングに従うことが議論されている [16]。式で表せば

$$a^0(L) - a_c \propto L^{-1/\nu} \quad (4)$$

となる。ここで、 L は1次元的な長さ、 ν は相関距離に関する臨界指数である。ペンローズ格子上のイジングモデルの場合にも、正の実軸に最も近い零点についてこの有限サイズスケーリングが成り立つ。2次元イジングモデルの場合に $\nu = 1$ であること、周期ペンローズ格子の格子点の数 N がほぼ τ^2 に従って増えていくことを考慮し、 $N = 199$, $N = 521$, $N = 1364$ の零点分布を虚軸方向にのみ $1, \tau, \tau^2$ を掛けてプロットすると、実軸上に近い零点の包絡線が1つの曲線に乗る。すなわち、零点分布の包絡線が有限サイズスケーリングに従うことを見出した。

この結果の詳しい解析は他の機会に示す。

謝辞

この研究は、台湾中央研究院の Ruben G. Ghulghazaryan 博士との共同研究である。ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] C. N. Yang and T. D. Lee, Phys. Rev. **87** (1952), 404; T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. **87** (1952), 410.
- [2] M. E. Fisher, in *Lectures in Theoretical Physics*, edited by W. E. Brittin (University of Colorado Press, Boulder, 1965), Vol. 7c, p. 1.
- [3] B. Derrida, L. De Seze, and C. Itzykson, J. Stat. Phys. **33** (1983), 559.
- [4] J. L. Monroe, J. Phys. A: Math. Gen. **34** (2001), 6405.
- [5] R. G. Ghulghazaryan, N. S. Ananikian, and P. M. A. Sloot, Phys. Rev. E **66** (2002), 046110.
- [6] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, Phys. Rev. Lett. **53** (1984), 1951.
- [7] Y. Okabe and K. Niizeki, J. Phys. Soc. Jpn. **57** (1988), 16; **57** (1988), 1536.
- [8] Y. Okabe and K. Niizeki, J. Phys. A **20** (1990), L733.
- [9] H. Feldmann, R. Shrock, and S.-H. Tsai, Phys. Rev. E **57** (1998), 1335.
- [10] P. D. Beale, Phys. Rev. Lett. **76** (1996), 78.
- [11] B. A. Berg and T. Neuhaus, Phys. Lett. B **267** (1991), 249; Phys. Rev. Lett. **68** (1992), 9.

- [12] J. Lee, Phys. Rev. Lett. **71** (1993), 211.
- [13] F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 2050; Phys. Rev. E **64** (2001), 056101.
- [14] N. A. Alves, J. R. Drugowich de Felicio, and U. H. E. Hansmann, Int. J. Mod. Phys. C **8** (1997), 1063.
- [15] N. A. Alves, J. R. Drugowich de Felicio, and U. H. E. Hansmann, J. Phys. A **33** (2000), 7489.
- [16] C. Itzykson, R. B. Pearson, and J. B. Zuber, Nucl. Phys. B **220** [FS 8] (1983), 415.