

Title	11.古典ハイゼンベルグ模型の計算機実験(臨界現象,研究会報告)
Author(s)	別役, 広
Citation	物性研究 (1977), 27(5): E29-E36
Issue Date	1977-02-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/89283
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

スピン系においては転移点以下の温度領域においてスピンの配列状態に Kosterlitz と、Thouless が予測したような渦生成がみられた。これに対応する量子スピン系（鈴木のとロッター表式による量子効果に因き一次元増した 3次元イジング・モデル）のシミュレーションにおいては転移点以下において非常に大きな領域の強磁性のクラスターが現われている。

2次元 XY モデルのシミュレーションについての詳しい報告は別稿にまとめたので、本誌別稿（鈴木、宮下、黒田、川端「2次元量子スピン系および古典スピン系のモンテ・カルロ法による研究——渦生成型の相転移——）を参照して下さい。また、量子系のモンテ・カルロ・シミュレーションは数学的困難性のためいまままで為されていなかったが鈴木のとロッター表示方法によって実行可能となった。これに関する詳しい報告は本誌別稿（鈴木、黒田、宮下「量子系の Monte Carlo 法の研究」）を参照して下さい。

古典ハイゼンベルグ模型の計算機実験

原 研 別 役 広

計算機実験は“理論的実験”ともいえる手法で、すでにくつかの問題に適用されて成功をおさめている。この方法によって得られた結果は、解析的な方法で求められた結果に対して“実験データ”を与えるし、また実験事実に対しては“理論的結果”を与えるものと考えることができる。その精度は主として計算機の使用時間に依存しているので、今後高速大型電子計算機が使用可能となるに従って重要性が増加することが予想される。ここではハイゼンベルグ型の相互作用をもつ 3次元および 2次元古典スピン系について、Watson¹⁾によるモンテカルロ法を用いて相転移の様相を調べた結果について報告する。

古典ハイゼンベルグ模型では、スピン \vec{S}_i を量子力学的演算子ではなく 3次元の単位ベクトルと考える。この時の系のハミルトニアンは、

別役 広

$$\mathcal{H} = - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1)$$

で与えられる。ここづ-2J は最近接点 i, j に位置する平行スピン対 $\langle i, j \rangle$ のエネルギーである。この古典的模型は、量子力学的模型に対して、低温領域ではよい近似とはなっていないが、転移点の近傍ではきわめてよい近似であることが認められている。

3次元の系では、スピンは単純格子の上に配列していて周期的境界条件を満しているものとして、 $4 \times 4 \times 4 (=64)$ 、 $8 \times 8 \times 8 (=512)$ 、 $14 \times 14 \times 14 (=2744)$ ケのスピンからなる三つの系について、自発磁化、帯磁率、内部エネルギー、比熱およびスピン相関関数の温度依存性を計算した。

有限の大きさの系では、相転移に伴う物理量の変化は急激には起らずに丸みをもつ。これは相関距離 ξ が系の大きさ L と同程度になることに起因している。ハイゼンベルグ系にモンテカルロ法を適用する場合には、イジング系にはない余分の“丸みの効果”が現れる。これは次のような特殊事情によるものである。イジング系の自発磁化は、上向きスピンと下向きスピンの数の差の平均から求まる。これに対してハイゼンベルグ系では、 $\vec{m} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} \vec{S}_{\mathbf{R}}$ で定義した磁化は、外部磁化がない時系は等方的であるので平均をとると零になる。このため通常は磁化の自乗平均の平方根を秩序変数として用いる。周期的境界条件を仮定すると、この量は次のように書ける。

$$M_{\text{rms}}^2 \equiv \langle \vec{m}^2 \rangle = \langle \vec{S}_0 \cdot \vec{m} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} \sigma(\vec{R}) \quad (2)$$

ここで \vec{S}_0 は中心のスピン、 $\sigma(\vec{R})$ は次式で定義されるスピン相関関数である。

$$\sigma(\vec{R}) = \langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_{\mathbf{R}} \rangle \quad (3)$$

短距離秩序度は転移点で零にならないので、転移点近傍での“丸みの効果”を引きおこす。温度が無限大の時でも $\sigma(\vec{R}) = \delta_{0\vec{R}}$ であるので、 $M_{\text{rms}} = N^{-\frac{1}{2}}$ のような常磁性磁化が残る。このような困難は、秩序変数を長距離相関を選び出すように定義することによって取除くことができる。中心のスピンから見て領界領域にある N_b ケのスピンを磁化を次の式で定義する。

$$\vec{m}_b = \frac{1}{N_b} \sum_{R \geq R_0} \vec{S}_R, \quad (R_0 \simeq L/2) \quad (4)$$

有限周期系では、中心のスピン \vec{S}_0 と \vec{m}_b との短距離相関は最小であるので、 \vec{m}_b を \vec{S}_0 の磁化の方向を決めるのに用いる。これから秩序変数を次のように定義する。

$$M_b = \langle \vec{S}_0 \cdot \vec{h}_b \rangle, \quad \vec{h}_b = \vec{m}_b / |\vec{m}_b| \quad (5)$$

図1に M_{rms} と M_b を温度の関数として示した。予想された通り、 M_b には高温での常磁性磁化はない。しかしイジング系でも見られる程度の“丸みの効果”は残っている。

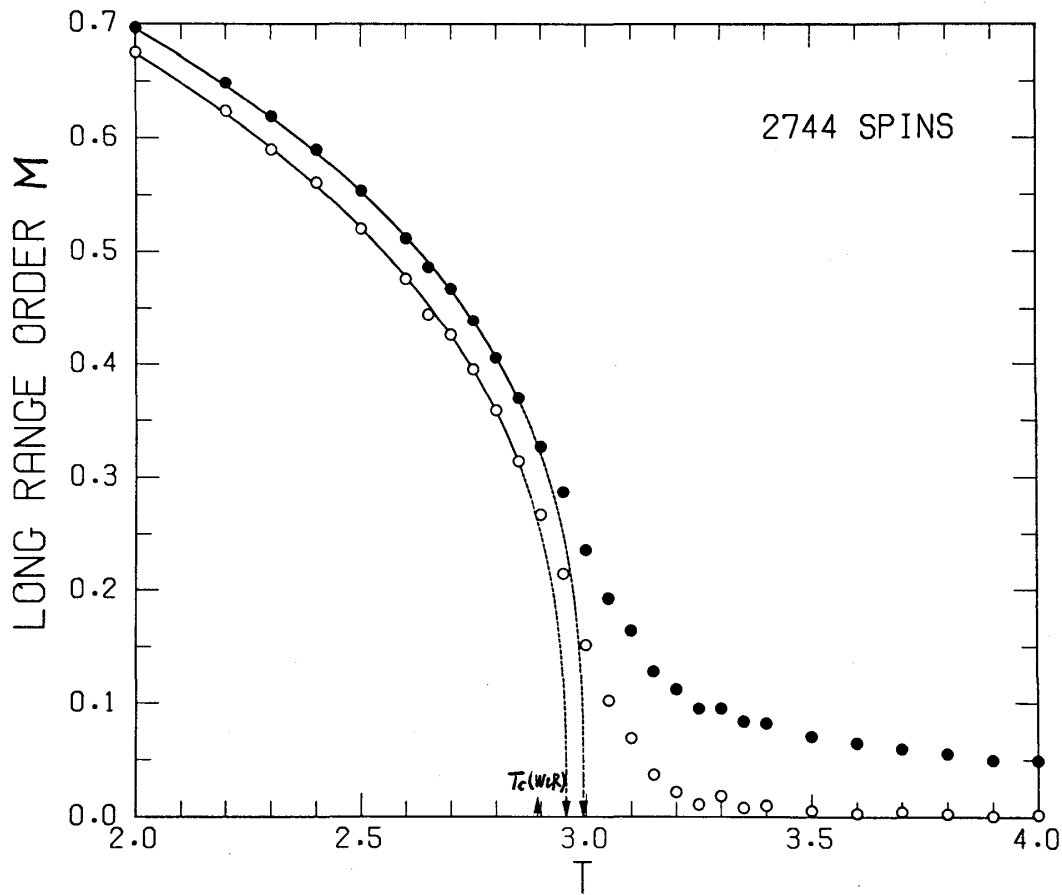


図1. 2744スピンからなる3次元ハイゼンベルグ系のモンテカルロ法によって決められた秩序変数の温度依存性。 $M_{rms}(0)$ と $M_b(0)$ は、それぞれ(2)式と(5)式で定義された秩序変数である。実線は表Iに与えられたパラメータを用いて $(1-T/T_c)^\beta$ をプロットしたものである。

別役 広

M_b の系の大きさに対する依存性は複雑であるので、無限大の系への外挿は行えない。その代り低温からの外挿を行った。次の形の冪乗則：

$$M(T) = (1 - T/T_c)^\beta \quad (6)$$

が、古典スピン系の磁化の $T=0$ から T_c までの温度変化をよく説明することは、Watson ら¹⁾ によって指適されている。ここでは β と T_c を最小自乗法による関数適合のパラメータと考え最適を行った。この適合性は非常に良い。その結果は表 I に与え²⁾ である。図 1 の曲線は表 I のパラメータを用いて引いたものである。Wood と Rushbrooke が高温級数展開の結果に比率法を適用して決めた転移温度は J/k を単位として、 $T_c(W \& R) = 2.89$ である。2744 スピン系の M_b から決めた T_c はこれより少し大きい。これに対して β は、Stephenson と Wood³⁾ が $0.1 \leq M \leq 0.4$ に対する磁気相境界から決めた値 $\beta = 0.38 \pm 0.03$ より多少小さい。 M_b から決めた β は厳密な意味での臨界指数ではなく、全温度領域での秩序変数の温度依存性を決める有効指数であるということ考えると、このような一致は注目すべきものである。

表 I. N ケのスピンからなる 3 次元ハイゼンベルグ系の有効指数 β と転移温度 T_c : $M(T) = (1 - T/T_c)^\beta$

	N	β	T_c
M_{rms}	512	0.318 ± 0.001	3.039 ± 0.003
	2744	0.329 ± 0.001	2.994 ± 0.003
M_b	512	0.340 ± 0.001	2.975 ± 0.003
	2744	0.350 ± 0.002	2.956 ± 0.003
		$0.38 \pm 0.03^a)$	$2.892^b)$

a) Ref. 3

b) Ref. 2

スピン相関関数は、モンテカルロのサンプリングを行う時に走行平均をとることによって計算した。図2に $\vec{R} = (4, 0, 0)$ までのスピン相関関数を温度の関数として示した。すべてのデータは $T_c(W \& R)$ に近い所で変曲点を示す。(1, 0, 0) の相関関数は内部エネルギーに関係している。高温側の点線は、Ritchie と Fisher⁴⁾ の高温級数展開の結果で、転移点近傍を除くと一致は非常に良い。R が十分大きい時に、スピン相関関数は磁化の自乗を与えるという関係があるので、 $(1 - T/T_a)^{2b}$ の形を仮定して最適するようにパラメータの b と T_a を決めた。T=0 から T_c までの適合性は非常に良い。図2の T_c 以下の実線はこのようにして引いたものである。

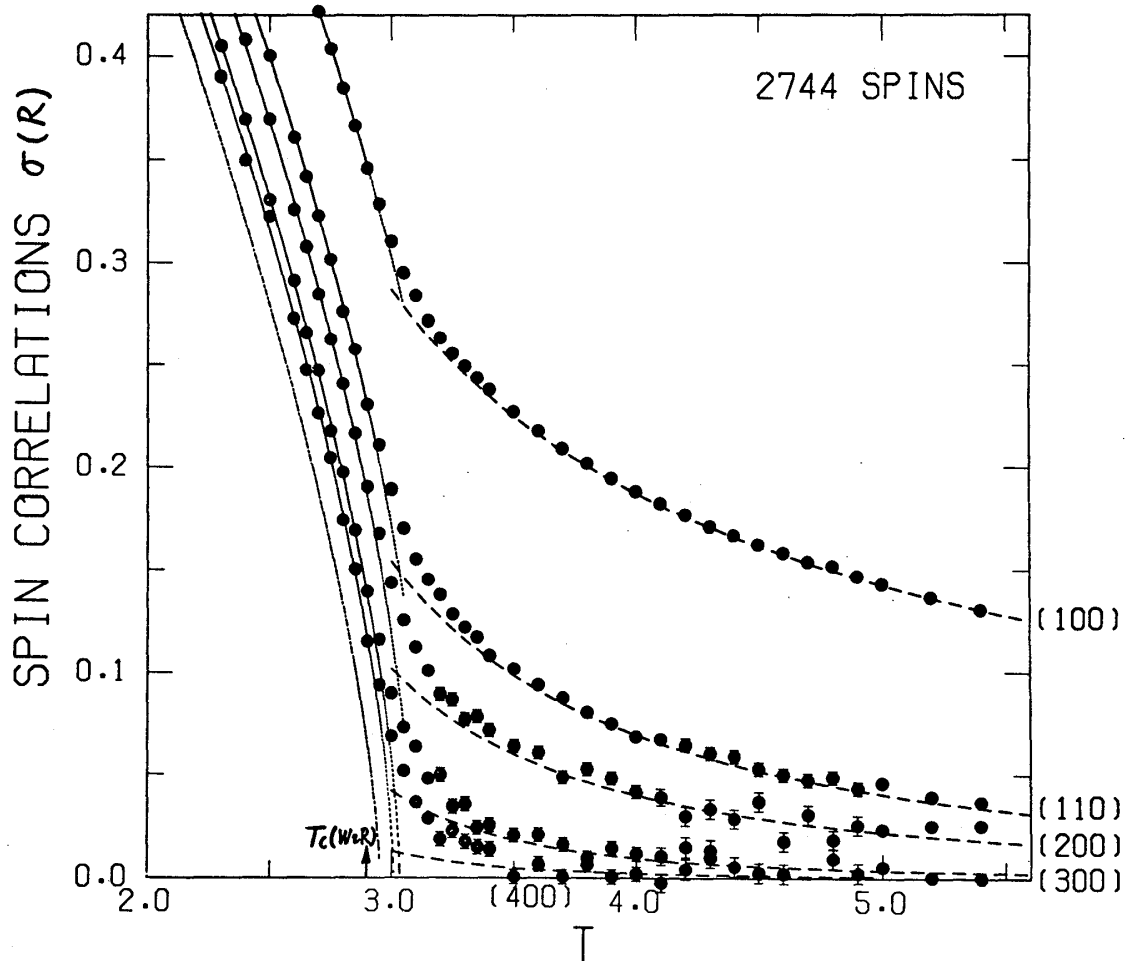


図2. 2744 スピンからなる 3次元ハイゼンベルグ系のスピン相関関数の転移点の上下での温度依存性。転移点の上では、点線で示めされた高温級数展開の結果と良く一致している。転移点より下の実線は $(1 - T/T_a)^{2b}$ に最適するようにプロットしたものである。

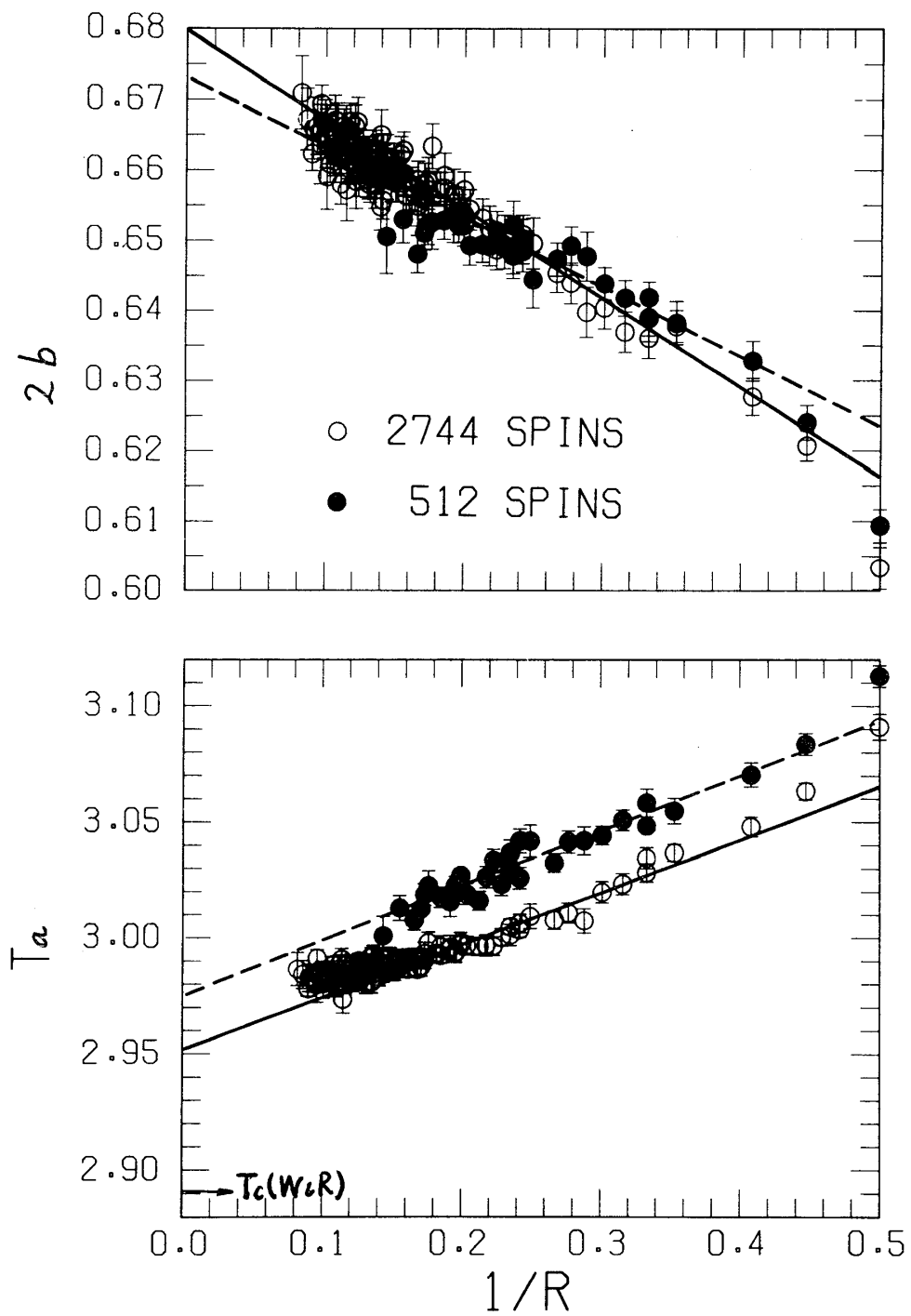


図3. スピン相関関数の有効指数 b と転移温度 T_a の $1/R$ 依存性: $\sigma(\vec{R}) = (1 - T/T_a(R))^{2b(R)}$ 。

b と T_a を $1/R$ の関数としてプロットしたのが図3である。これから分るように b と T_a は境界領域に至る迄 $1/R$ に大体比例している。 $R \rightarrow \infty$ として求めた値は $b = 0.340 \pm 0.002$, $T_a = 2.955 \pm 0.003$ で M_b から求めた値と大体一致している。

スピン相関関数のこのような振舞いは、これまで知られていないが、3次元ハイゼンベルグ系の性質のよりよい理解への手掛りを与えるものと考えられる。

系の大きさが無限大の2次元ハイゼンベルグ系では絶対零度を除いて自発磁化が存在しないということが、Mermin と Wigner⁵⁾ によって厳密に証明されている。これに対して Stanley と Kaplan⁶⁾ は、高温級数展開の逐次項に比率法を適用することにより、この系でも3次元ハイゼンベルグ系の場合と同様に帯磁率が有限温度 $T_{SK} \simeq 0.42T_M$ で発散するという結果を得た。(ここで T_M は平均場理論での転移温度で $(8/3)J/k$ である。)そしてこの温度以下ではスピン相関が長距離であるために帯磁率は発散するが自発磁化は零であるような相が存在していると主張している。

モンテカルロ法を用いてこの系の相転移の様相を調べた。スピンは正方格子の上に配列していて周期的境界条件を満足しているとして、スピン数 N が $10 \times 10 (=100)$, $30 \times 30 (=900)$, $50 \times 50 (=2500)$ の三つの系について実験を行った。モンテカルロのステップ数は転移温度の近傍で1スピン当たり1万回程度行った。図4に磁化の自乗平均 $\langle m^2 \rangle$ と最近接相関 $\sigma(1)$ の温度依存性を示した。大体の傾向は Watson⁷⁾ の結果と一致している。すべてのデータは $T = 0.55$ の近傍で変曲点を示しているので、この温度附近に相転移があるように見える。 $\sigma(1)$ の N 依存性は小さい。高温側の点線は7次迄の級数展開の結果で、 $T = 0.55$ 近傍まで良い一致をしている。2500 スピンまでの有限系では $T \simeq 0.5$ 以下でも磁化が残っている。これはこの温度以下では相関距離が系の大きさより大きくなっていることによると考えられる。低温側の点線は、有限周期系でのスピン波近似による温度変化である。 $\sigma(1)$ の減少は系の大きさによらず、実験との一致も良い。また、 $\langle m^2 \rangle$ の N 依存性は、

$$\langle m^2 \rangle = 1 - \frac{2}{3\pi} \frac{T}{T_M} \ln N$$

で与えられるが、実験との一致は大体良い。

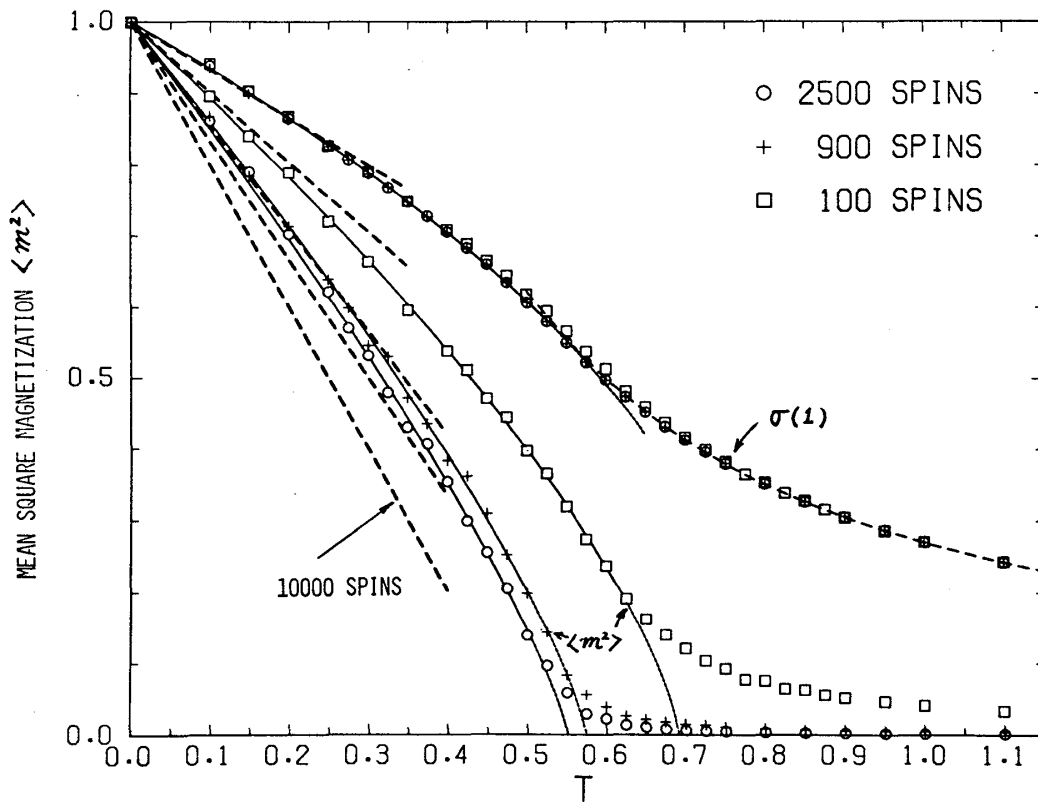


図 4. 2次元ハイゼンベルグ系のモンテカルロ法によって決められた磁化の自乗平均 $\langle m^2 \rangle$ と最近接相関 $\sigma(1)$ の温度依存性。高温側の点線は $\sigma(1)$ の高温級数展開の結果を示めす。低温側の点線はスピン波近似による温度変化を示めている。

参 考 文 献

- 1) R. E. Watson, M. Blume and G. H. Vineyard : Phys. Rev. **181** (1969) 811.
- 2) P. J. Wood and G. S. Rushbrooke : Phys. Rev. Letters **17** (1966) 307.
- 3) R. L. Stephenson and P. J. Wood : J. Phys. C**3** (1970) 90.
- 4) D. S. Ritchie and M. E. Fisher : Phys. Rev. **B5** (1972) 2668.
- 5) N. D. Mermin and H. Wigner : Phys. Rev. Letters **17** (1966) 1133.
- 6) H. E. Stanley and T. A. Kaplan : Phys. Rev. Letters **17** (1966) 913.
- 7) R. E. Watson, M. Blume and G. H. Vineyard : Phys. Rev. **B2** (1970) 684.