

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—

東大理学部 鈴木増雄, 宮下精二, 黒田 昭**

岡山大計算センター 川端親雄

目 次

§ 1	概 論
§ 2	量子スピン系の相転移
§ 3	古典スピン系の相転移
§ 4	考 察

要 約

2次元XYモデルにおいて新しい型の相転移が発見された。モンテ・カルロ法を用いた研究によれば、比熱には発散が認められないにもかかわらず帯磁率には発散が起り、特に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。

§ 1. 概 論

2次元XYモデルの臨界現象に関する研究^①は量子系および古典系を問わず最近盛んに行われている。これは Stanley と Kaplan^②が通常の長距離秩序がなく、且つ自発磁化のない系についての高温展開法による研究の結果、相転移の存在を提唱したことが契機となっている。その後の研究にもかかわらず、この問題は理論的に賛否相半ばし、まだ決着がついていない。

我々の研究の目的はこの問題に対して最終的な判定を下すとともに、新たな概念を提

*) 「 Physics Letter 」に投稿中

**) Parmanent address 山形大農業工学科

案し過去および将来の理論研究についての明確な基礎づけを与えようとするものである。研究方法としてはモンテ・カルロ法を用いた。

§ 2. 量子スピン系の相転移

2次元XYモデルのハミルトニアンを次式のように表示する。

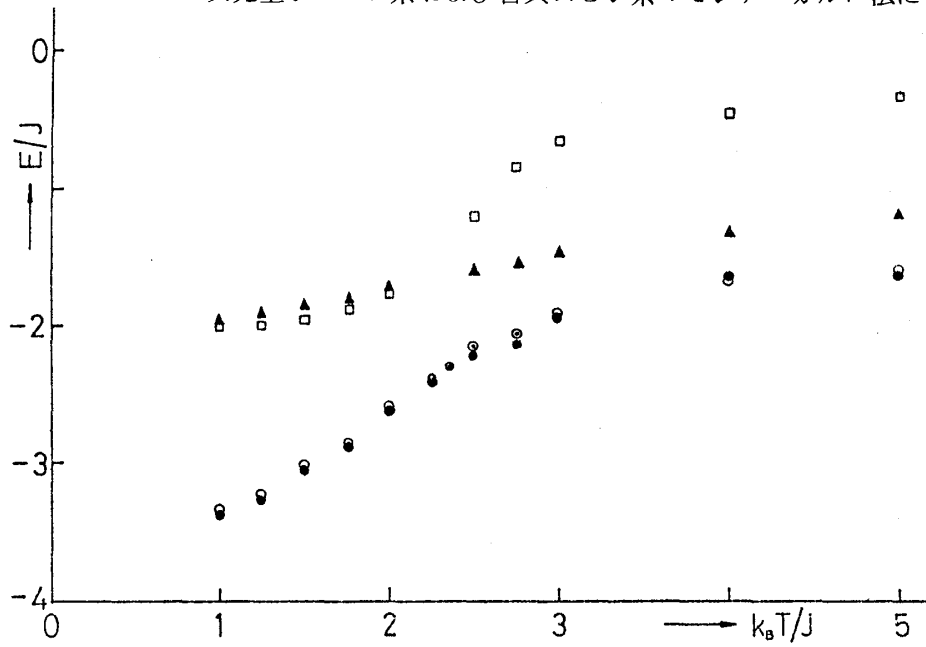
$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i, j \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \mu H \sum_j \sigma_j^y \quad (1)$$

ここで量子系の場合 $\{\sigma_j^x\}$ はパウリ行列を表わす。古典系の場合には σ_j は単位ベクトルを表わし、 $(\sigma_j^x)^2 + (\sigma_j^y)^2 + (\sigma_j^z)^2 = 1$ である。

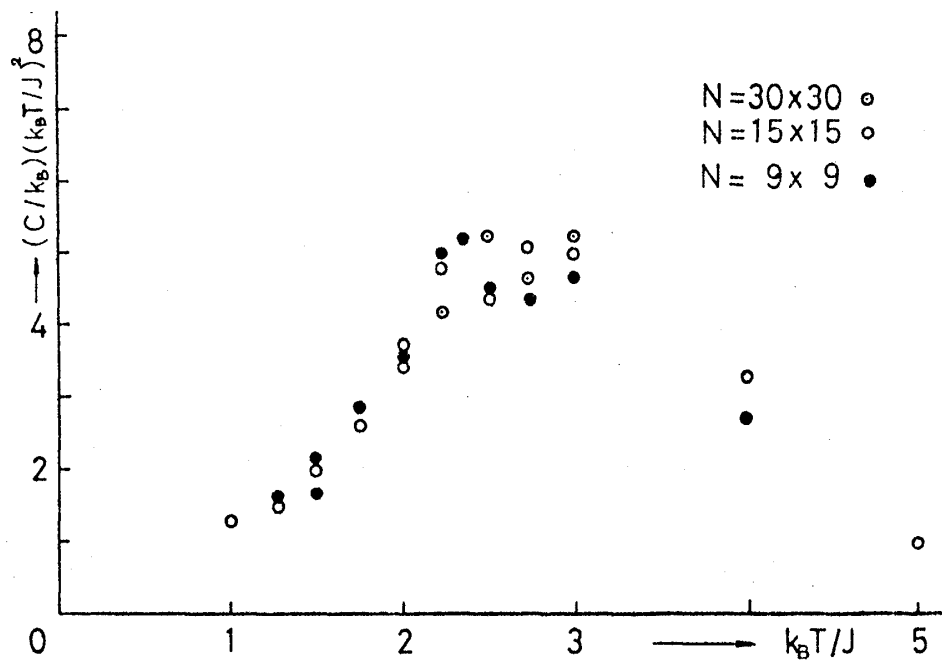
量子スピン系のモンテ・カルロ法を適用する際の方法論は鈴木(増)の研究⁽³⁾によって与えられた。この方法論に従って周期条件を有する2次元正方格子で Trotter 表式⁽³⁾による第一層(量子化軸n軸方向の層n=1)の場合のXYモデル，HeisenbergモデルおよびIsingモデルの数値実験を行った。正方格子のサイズの大きさNは9×9, 15×15, 30×30の3通りとしてサイズの効果の有無も判断できるように計画した。算出する物理量としてはエネルギー，比熱および帯磁率の値とした。また，量子スピン系のモンテ・カルロ法の詳細については本誌別稿(鈴木，黒田，宮下「量子系のMonte Carlo法の研究」)を参照されたい。

量子スピン系の数値実験の結果を第1図から第3図に示す。第1図は2次元のXYモデル，HeisenbergモデルおよびIsingモデルのそれぞれについてのエネルギーの温度依存性を示したものである。Isingモデルについては図を見ればわかる通りOnsagerの厳密解と一致している。XYモデルについては正方格子のサイズの大きさを3通りに変えた場合の値が表示されているがサイズの効果はほとんど現われていない。

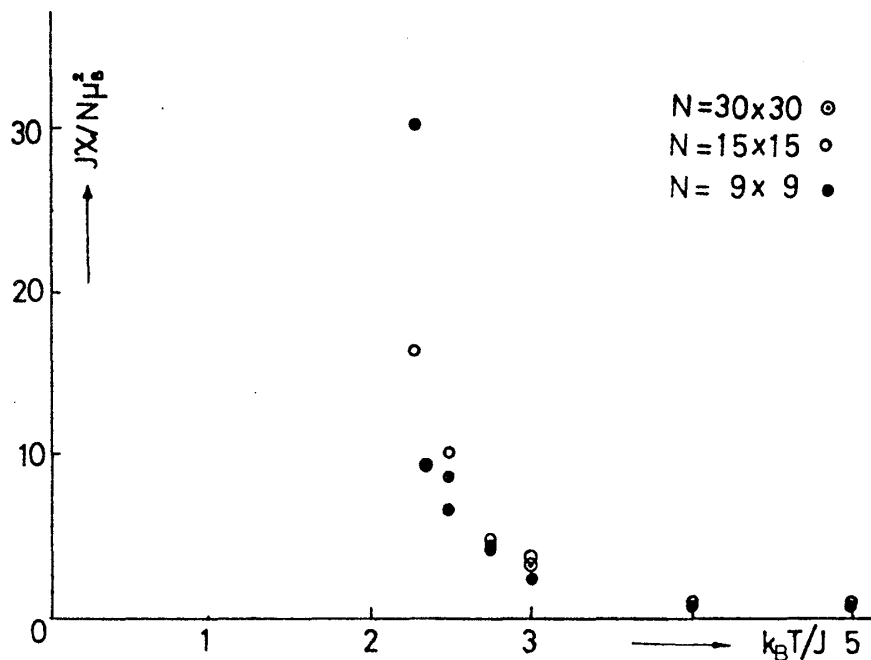
第2図にはXYモデルの比熱(エネルギー相関)の温度依存性を示してある。比熱の場合にもサイズの効果は現われていない。また，この図を見ればわかる通り比熱には発散が現われていないと思われる。但し，カスプ的な異常性の可能性まで否定するものではないが，これは測定点を増すとかモンテ・カルロ・ステップの回数を多くする等の精度の向上を計らないと明確な判定は下せないと思われる。量子スピン系のモンテ・カルロ・ステップ回数はスピン当り1000回から1600回である。



第1図 2次元量子スピン系のエネルギー(スピン当り)と温度の関係
 □: ISINGモデル, △: Heisenbergモデル, ●: XYモデル(以上正方格子9×9)
 ○: XYモデル(正方格子15×15), ⊙: XYモデル(正方格子30×30)



第2図 2次元量子スピン系XYモデルの比熱(スピン当りのエネルギー相関)と温度の関係



第3図 2次元量子スピン系XYモデルの帯磁率(スピン当り)と温度の関係

第3図にはXYモデルの帯磁率の温度依存性を示す。これによると明らかな発散が温度($k_B T_c$)の2J附近に認められる。また、サイズの効果も現われており、サイズが小さくなる程発散の「なまり」が生じてきている。これらの結果、すなわち、比熱には発散がなく帯磁率に発散が生ずるということは Betts 等⁽¹⁾の高温展開法による研究結果と一致している。スピンの配列状態をみると T_c 以下において非常に大きな強磁性のクラスターが発生している。このことは次に論じる古典系XYモデルの T_c 以下における渦生成パターンに相当しているものと思われる。

第4図に量子スピン系のスピンの配列状態を示す。(a)図の温度は2.25Jで T_c 附近のものであるが(b)図の高温側のものと比較するとクラスター化の傾向は既に生じはじめていることがみてとれるであろう。

図の中の数字一つ一つは量子状態を表わしているn軸方向のスピンの配列状態を示している。xy平面すなわち実空間のスピンの配列状態(上向きスピンか下向きスピン)を知るには数字をみて偶数であれば下向きスピンであり、奇数であれば上向きスピンの状態を表わしていることになっている。

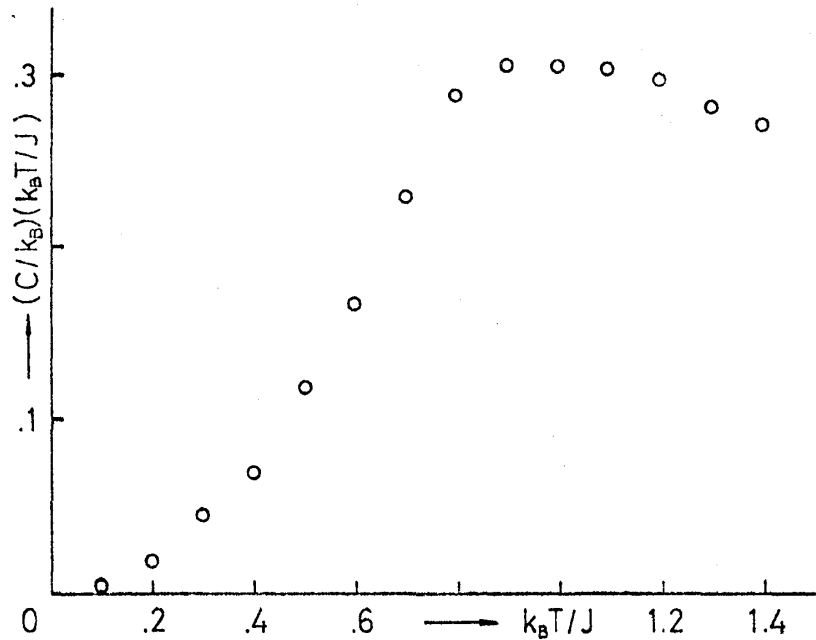
MP	MONTE CARLO SIMULATION	FLIP AND ENERGY	NO.	1	CONFIGURATION	MP										
0	0	2	29	31	31	31	0	0	31	31	0	0	31	31	0	0
0	0	2	17	8	4	31	31	31	31	31	0	0	31	31	0	0
12	0	17	23	8	6	31	0	31	31	31	31	0	0	31	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	31	31	31	31	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	31	31	31	0	0	31	0	0
0	0	0	0	0	0	12	4	0	31	31	31	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	17	25	0	31	31	31	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	31	31	31	31	31	31	0	0	31	0	0
0	0	0	0	0	0	31	31	31	31	31	31	0	0	31	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	31	31	31	0	0	31	0	0
0	0	0	0	0	0	12	27	31	31	31	31	0	0	31	0	0
0	0	0	0	31	31	31	31	31	31	31	31	0	0	31	0	0
0	0	0	0	31	31	0	0	0	2	29	31	31	31	31	31	0
0	0	0	0	0	0	17	25	31	31	31	31	31	31	31	31	0
27	4	0	0	0	0	31	31	0	31	31	31	19	27	31	31	29
10	6	0	0	0	0	0	0	0	31	31	31	17	27	31	31	23
14	0	0	0	0	0	0	0	0	31	31	31	14	8	6	0	0
0	31	31	31	31	0	0	0	0	0	31	31	0	31	12	27	0
0	31	31	31	31	0	0	0	0	31	31	31	19	6	29	31	14
31	31	31	31	31	0	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31
31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31
31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31
31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31
31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31
0	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31	31
0	0	19	27	31	31	31	31	0	0	31	31	31	31	31	31	31
0	0	17	14	31	31	31	31	31	0	31	31	31	31	31	31	31

MP = 445

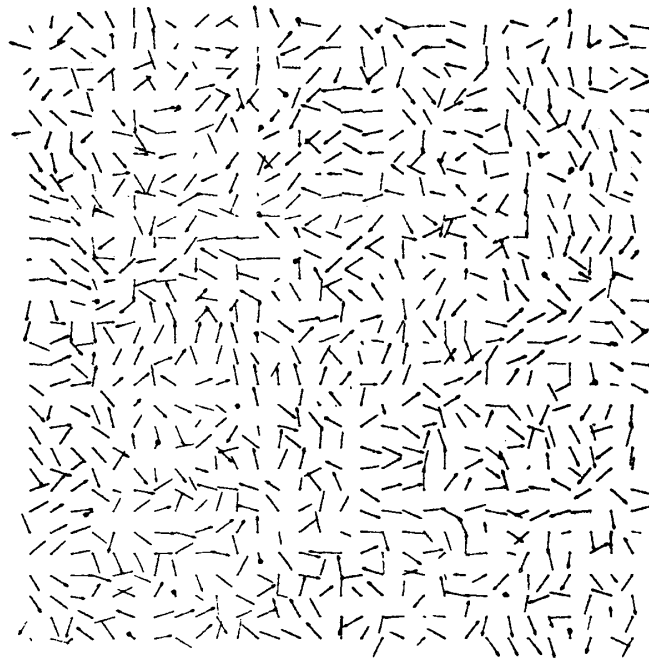
第4図 2次元量子スピン系XYモデルのスピン配列状態 (a) $k_B T = 2.25J \simeq k_B T_c$.
 平面内の配置がスピン配置を表わしており、0~31の数字がそのスピンの“量子化軸方向”の状態を表わす Ising スピンの状態を表わしている。Ising スピンの状態は数字を2進数に直し1→(up)↑
 0→(down)↓と読みかえればよい。
 (例) 31=(↑↑↑↑), 0=(↓↓↓↓), 21=(↑↓↑↑), etc

§ 3. 古典スピン系の相転移

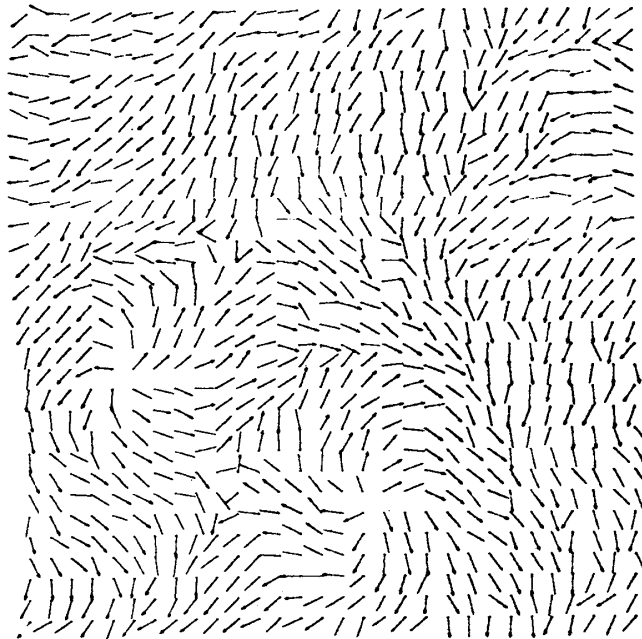
古典スピン系XYモデル（周期条件を有する2次元正方格子で大きさ 30×30 ）に Binder 等によって開発された通常のモンテ・カルロ法⁽⁵⁾⁽⁶⁾を適用してみると相転移の構造的な様子がもっと明確に現われる。第5図に比熱（エネルギー相関）の温度依存性の数値実験の結果を示してあるが明らかに発散は認められない。これは量子スピン系の結果（第2図）とも対応している。



第5図 2次元古典スピン系XYモデルの比熱（スピンのエネルギー相関）と温度の関係



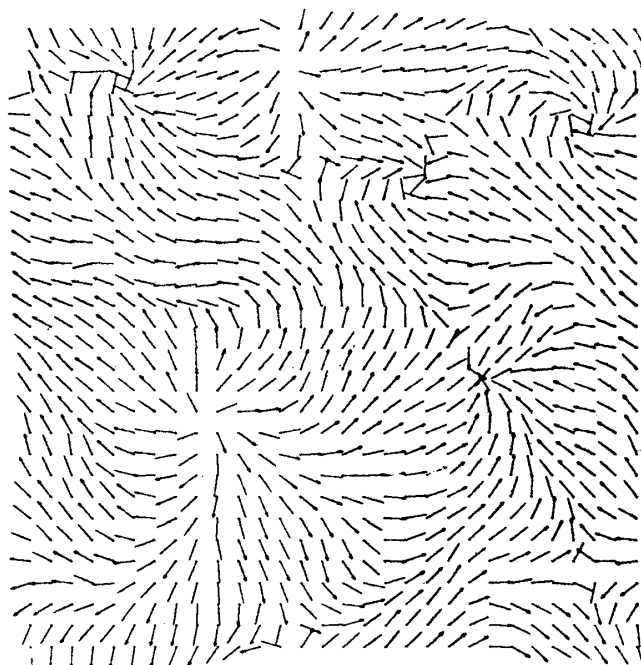
(a) $k_B T = 1.0J$



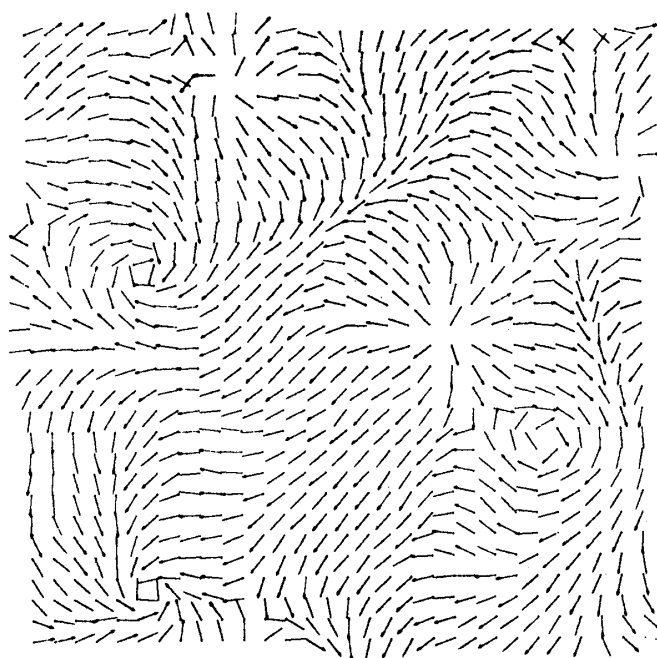
(b) $k_B T = 0.2J$

第6図 2次元古典スピン系XYモデルの典型的なスピン配列状態

スピンに矢印がついているのは平面より少し上向きのもので、ついていないのは少し下向きのもを表わす。スピンの長さは平面に射影したベクトルの長さである。



(d) $k_B T = 0.001 J$



(c) $k_B T = 0.01 J$

鈴木増雄, 宮下精二, 黒田 昭, 川端親雄

第6図は温度 ($k_B T$) が $0.2J$ と $0.01J$ とかの低温のときの典型的なスピンの配列状態を示したものである。図をみるとわかるように多くの渦とか, もっと一般的なディスクリネーション— disclination — (吸い込み口とか湧き出し口) が温度にして約 $0.5J$ 以下において現われてくる。これは Kosterlitz と Thouless⁽⁷⁾ が現象論的に推測したものとはほぼ類似したものとなっている。しかし, 転移点 (T_c) については彼等が予測した値よりも低温側の値となっている。これは彼等のスピン・モデルが xy 平面内のみの異方交換相互作用であるのに対して, 我々の古典スピン系モデルは3方向の自由度を有しており1自由度分だけ低温側に転移点が見られるのであろうと思われる。他の原因としては「渦」の中に大きな強磁性の領域が存在していることも関係していると思われる。

そしてこれらの大きな強磁性の領域の存在は帯磁率が発散する原因になっているものと考えられる。事実, シミュレーションにおいて xy 平面内において小さな磁場をかけるとスピンの配列状態は磁場の方向に急激に揃っていくことがみられる。これは応答の特異性が磁場に関係していることを意味している。また一方では短距離秩序の発達は, かなりゆっくりしており, 比熱のなめらかさと対応している。渦またはディスクリネーションは周期条件のないモデルについても現われる。

単純な発散構造 (純粋な湧き出し) の場合のエネルギーを計算してみると $E \sim \pi J \log (R/a_0)$ となる。ここに R は半径であり, a_0 は一つの正方格子の一辺の長さである。またこのエネルギーは同心円型の渦の場合と等しい⁽⁷⁾。これから第一次近似として転移点 $k_B T_c \simeq \frac{1}{2} \pi J$ が得られるが, これは Kosterlitz 等の理論と対応している。しかし数値実験の結果と比較するとまだ高温側にずれている。ディスクリネーション間の相互作用の効果を導入すればもっと正確な値が得られると思われる。ディスクリネーションの数および大きさは温度に依存しているがこれらの詳しい報告は近く発表する予定がある。これらの数値実験は動的な XY モデルにもとづいているので, 将来, 結果の微視的な説明は動的な XY モデルの枠組みの中でなされるか, または, 同じことではあるが2成分の TDGL モデルで与えられるのであろうと思われ, 目下その方面の研究も行いつつある。

§ 4. 考 察

上述の結果は当面の話題となっているスピン・ガラスとかランダム・ボンドの磁性モ

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
デルの臨界現象との類似性を暗示している。

その理由としては通常の長距離秩序が存在しないのに応答関数とか帯磁率に特異性が
存在することである。また比熱に発散がないことも類似点の1つである。この類似性の
物理的な意味としてはこれら双方の系とも転移点以下においてある意味において大きな
クラスターができることにあると思われる。

ここにこの新しい型の相転移を説明するオーダー・パラメーターとして二つの場合が
考えられるであろう。一つにはディスクリネーションまたは渦の数、もう一つはある物
理的な意味においての時間座標における長距離秩序がオーダーパラメーターになってい
ることが考えられるであろう。

量子スピン系、古典スピン系の両方とも同じような臨界現象を境界の次元である2次
元系において示すことは十分理由のあることである。ここでの量子スピン系は Trotter
-表式を用いて表現され、漸近的に古典系に対応しているからである。尚、これらの漸
近的等価性の証明とかその他の詳しい内容については近く発表する予定である。

xy 平面内に制限された古典スピン系のシミュレーションについては臨界現象の普遍
性の確認のため実行する予定である。このモデルについては既に Kosterlitz と Thouless
によって論ぜられたものである。

2次元量子スピン系 Heisenberg モデル (周期条件を有する正方格子大きさ 9×9) の
シミュレーションの結果は比熱にも帯磁率にもなんの異常も現われてこなかった。

2次元系の量子スピン系および古典スピン系 XY モデルの他の物理的な結果およびそ
の詳細については数値実験にもとずいた理論的な考察とともに近く報告する予定である。

本研究に関して東大久保亮五先生、鈴木秀次先生、二宮敏行先生、平川金四郎先生に
有益なる助言を載いたことを感謝します。

また著者の一人川端はSaarkrückenにおいて K. Binder 教授に懇切な激励と共にモンテ
・カルロ法の方法を御教授頂いたことを記して感謝の意を表します。

参 考 文 献

(1) XY モデルのレビューは次を参照されたい。

D. D. Betts "Phase Transition and Critical Phenomena" Vol. 3 (edited by C.
Domb and M. S. Green) Academic Press, New York, または C. Kawabata, J. Phys.

鈴木増雄, 宮下精二, 黒田 昭, 川端親雄

Soc. Japan **28** (1970) 1396

J. Rogiers and R. Dekeyser, Phys. Rev. **B13** (1976) 4886

(2) H. E. Stanley and T. A. Kaplan, Phys. Rev. Lett. **17** (1966) 913.

(3) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454

Commun. Math. Phys. **51** (1976) 183.

(4) 「相転移に関するバンフ夏の学校(カナダ'76.8)」において鈴木(増)が量子スピ
ン系のシミュレーションの結果の一部を報告した。

(5) K. Binder and H. Ranch, Phys. Lett. **27A** (1968) 247

R. E. Watson, M. Blume and G. H. Vineyard, Phys. Rev. **B2** (1970) 684

(6) K. Binder and D. P. Landau, Phys. Rev. **B13** (1976) 1140

(7) J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C. Solid State Phys. **6** (1973), 1181

J. M. Kosterlitz 同上誌 **7** (1974) 1046

V. L. Berezinskii, Soviet Phys. JETP **32** (1971) 493

J. Zittartz, Z. Physik **B23** (1976) 55 and 63

(8) S. F. Edwards and P. W. Anderson, J. Phys. F.: Metal Phys. **5** (1975) 965